

Prof. Dr. Tilman Pfau, Universität Stuttgart

Fortgeschrittene Atomphysik

Stuttgart, Wintersemester 2013 / 2014

Revision: 16. September 2014

Für Hinweise auf Druckfehler und Kommentare jeder Art bin ich dankbar.¹

¹Henri Menke, henrimenke@gmail.com

Übertragung in L^AT_EX durch Henri Menke, Michael Schmid, Marcel Klett und Jan Schnabel.

Literatur

- [1] M. Bellac. *Quantum Physics*. Cambridge University Press, 2006. ISBN: 978-1-139-45079-9.
- [2] D. Budker, D. Kimball und D. DeMille. *Atomic Physics: An Exploration Through Problems and Solutions*. Oxford University Press, 2004. ISBN: 978-0-198-50950-9.
- [3] J. Dalbard und C. Cohen-Tannoudji. „Dressed-atom approach to atomic motion in laser light: the dipole force revisited“. In: *J. Opt. Soc. Am. B* 2.11 (Nov. 1985), S. 1707-1720. DOI: [10.1364/JOSAB.2.001707](https://doi.org/10.1364/JOSAB.2.001707). URL: <http://josab.osa.org/abstract.cfm?URI=josab-2-11-1707>.
- [4] W. Demtröder. *Laserspektroskopie: Grundlagen und Techniken*. Springer London, Limited, 2009. ISBN: 978-3-540-33793-5.
- [5] C. Foot. *Atomic physics*. Oxford master series in physics. Oxford University Press, 2005. ISBN: 978-0-198-50696-6.
- [6] H. Friedrich. *Theoretische Atomphysik*. Springer London, Limited, 2011. ISBN: 978-3-642-85162-9.
- [7] C. Gerry und P. Knight. *Introductory Quantum Optics*. Cambridge University Press, 2005. ISBN: 978-0-521-52735-4.
- [8] J. D. Jackson. *Classical electrodynamics*. Bd. 3. Wiley New York etc., 1962.
- [9] M. Reiter und A. Wolf. *Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science*. Wiley, 2009. ISBN: 978-3-527-62749-3.
- [10] J. Sakurai. *Advanced Quantum Mechanics*. Pearson Education, Incorporated, 2006. ISBN: 978-8-177-58916-0.
- [11] F. Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. Advanced Texts in Physics Series. Springer, 2008. ISBN: 978-3-540-85601-8.
- [12] M. Scully und S. Zubairy. *Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1997. ISBN: 978-0-521-43595-6.
- [13] Woodgate. *Elementary Atomic Structure*. Oxford University Press, USA, 1980. ISBN: 978-0-191-58961-4.

Dieses Werk ist unter einer Creative Commons Lizenz vom Typ Namensnennung - Nicht-kommerziell - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 3.0 Deutschland zugänglich. Um eine Kopie dieser Lizenz einzusehen, konsultieren Sie <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/de/> oder wenden Sie sich brieflich an Creative Commons, 444 Castro Street, Suite 900, Mountain View, California, 94041, USA.

im Vakuum, 8
 Modendichte, 14
 Orthohelium, 30
 Orthonormalitätsrelation
 Kugelflächenfunktionen, 24
 Parahelium, 30
 Paritätsoperator, 7, 24
 Pauli-Spin-Matrizen, 2
 Penning Falle, 33
 Phasengeschwindigkeit, 80
 Quantendruck, 101
 Rabi Frequenz, 44
 Rotating Wave Approximation, 45
 Rydberg-Atom, 35
 Sättigungsparameter, 53
 Sisyphos Kühlmechanismus, 65
 Slaterdeterminante, 30
 Spindichte, 18
 Spinwellenfunktion
 Singulett, 30
 Triplett, 30
 STRAP, 74
 Streulänge, 84, 87
 Streuquerschnitt, 86
 Subrecoil cooling, 67
 Suszeptibilität, 77
 Thomas-Fermi Näherung, 96, 97
 Thomas-Fermi Radius, 96
 Varianz, 12
 Wirkungsquerschnitt, 85
 Zeemaneffekt, 20
 Zyklotronfrequenz, 34

Inhaltsverzeichnis

1 Atomstruktur	1
1.1 Dirac-Gleichung, Elektronenspin und Feinstruktur	1
1.1.1 Der Spin des Elektron	4
1.1.2 Das magnetische Moment des Elektron	5
1.1.3 Das Wasserstoffatom in der Dirac-Theorie	6
1.2 Feldquantisierung	8
1.2.1 Quantenfluktuationen	12
1.2.2 Multimoden Felder und Zustandsdichte	12
1.3 Lambshift	14
1.4 Hyperfeinstruktur und Zeemaneffekt im Wasserstoffatom	17
1.5 Übergänge und Auswahlregeln	22
1.6 Das Heliumatom	25
1.6.1 Angeregte Zustände	28
1.6.2 Elektronenspin und Pauli-Prinzip	30
1.7 Alkali Atome	31
1.8 Grund- und angeregte Zustände von Mehrelektronenatomen	32
1.9 Geonium	33
1.10 Rydbergatome	35
1.10.1 Grundlegende Eigenschaften von Rydbergatomen	35
1.10.2 Rydbergatome im elektrischen Feld	37
1.10.3 Sonstiges	38
2 Atom-Licht Wechselwirkung	39
2.1 Zwei Niveau System: Rabi Oszillation	39
2.1.1 Jaynes-Cummings-Modell	39
2.1.2 Zwei-Niveau-Atome	46
2.1.3 Spontane Emission und optische Blochgleichungen	51
2.2 Lichtkräfte und Laserkühlung	54
2.2.1 Dipolkraft und spontane Lichtkraft	55
2.2.2 Laserkühlung	57
2.2.3 Die Dopplerkühlung	60
2.2.4 Magneto-optische Falle	63
2.2.5 Die Sub-Dopplerkühlung	63
2.2.6 Subrecoil cooling	67
2.3 Drei-Niveau-Atome	70
2.3.1 Das klassische Modell	70
2.4 Elektromagnetisch induzierte Transparenz (EIT) optischer Medien	75
2.5 Pulspropagation	79
3 Atom-Atom Wechselwirkung	83
3.1 Streutheorie	83

- 3.2 Streuproblem 84
 - 3.2.1 Streuung am Kastenpotential 88
 - 3.2.2 Temperaturabhängigkeit der s -Wellenstreuung 89
- 3.3 Feshbachresonanzen 90

4 Ultrakalte Atome 93

- 4.1 Bose-Einstein-Kondensation 93
 - 4.1.1 Effekt der Atom-Atom-Wechselwirkung 93
 - 4.1.2 Grundzustand eines BEC in einer harmonischen Falle 95
- 4.2 Hydrodynamische Gleichungen 100
 - 4.2.1 Anregung à la Bogoliubov 101
 - 4.2.2 Landaukriterium 103

A Beweise der Kommutatorrelationen 109

B Theoretische Behandlung der Laserkühlung 111

C Quantenmechanische Streuung 117

Index 129

Index

- Abschirmung
 - elektrostat. 27
- Anzahloperator, 11, 42
- Austauschoperator, 27
- Auswahlregeln
 - Dipolübergänge, 23
- Autler-Townes-Aufspaltung, 73
- Beersche Absorptionsgesetz, 75
- Blochgleichungen, 49
 - 3-Niveau-Atom, 77
- Blochgleichungen
 - optische, 53
- Blochsphäre, 49
- Bogoliubov-Gleichungen, 102
- Bogoliubov-Dispersionsrelation, 103
- Bogoliubov-Spektrum, 106
- Bose-Einstein-Kondensation, 93
- Brechungsindex, 80
- bright state, 68
- Chemische Potential, 96
- Clebsch-Gordan-Koeffizienten, 20
- dark state, 68
- de Broglie-Wellenlänge, 83
- Dichtematrix, 48
- Dipoldichte
 - magnetische, 18
- Dipolkraft, 56
- Dipolmatrixelement, 23
- Dipolwechselwirkung, 22
- Dirac-Gleichung
 - stationär, 3
- Dirac-See, 3
- Dirac-Spinoren, 3
- Dopplerkühlung, 60, 111
- Dopplertemperatur, 63, 115
- Drei-Niveau-Atom, 70
- Ehrenfest-Theorem, 54
- Einstein-Relation, 115
- Energie-Impuls-Beziehung
 - relativistisch, 1
- Eulergleichung einer Quantenflüssigkeit, 101
- Feinstrukturkonstante, 8
- Feshbachresonanzen, 90
- Fock-Zustand, 41
- Fockzustände, 11
- Gesamt Drehimpuls, 5
- Gesamt Drehimpulsfunktionen, 5
- Gross-Pitaevskii-Energiefunktional, 98
- Gross-Pitaevskii-Gleichung, 97
- Gruppenschwindigkeit, 80
- Gruppenindex, 80
- Hamiltonoperator
 - Jaynes-Cummings, 45
 - single-mode-Feld, 42
 - Zwei-Niveau-System, 40
- Pauli, 6
 - relativistisch, 1
- Healing-Länge, 96
- Healinglänge, 99
- Heliumatom, 25
- Hundschen Regeln, 32
- Hyperfeinstruktur, 17
- Jaynes-Cummings-Modell, 39
- Kastenpotential, 88
- Kontinuitätsgleichung, 100
- Lambshift, 14
- Landé-Faktor, 6
- Landaukriterium, 103
- Landaukriterium, 104
- Laserkühlung, 58
- Leiternoperatoren, 10
- Lorentz-Modell, 46
- Magnetisches Moment
 - Elektron, 6
- Magnetonfrequenz, 34
- Maxwellgleichungen

Für die S-Wellenstreuung setzen wir den Index der Neumann- bzw. Besselfunktionen $l = 0$, was uns auf einen Ausdruck der Phasenverschiebung liefert

$$\frac{n_0(ka)}{j_0(ka)} = \cot(\delta_0)$$

$$\frac{\sin(ka)}{\cos(ka)} = \cot(\delta_0) \tag{C.76}$$

$$-\cot(ka) = \cot(-ka) = \cot(\delta_0) - ka = \delta_0$$

Für ein Abstoßendes Potential ist die Phasenverschiebung also negativ. Betrachten wir nicht den Fall der S-Wellenstreuung, sondern entwickeln wir (C.74) nach kleinen k ergibt dies einen Ausdruck der Phasenverschiebung folgender Art

$$\tan(\delta_l) = \frac{(2l+1)}{[(2l+1)!]^2} (ka)^{2l+1} \frac{l - a\alpha_l}{l + 1 + a\alpha_l} \tag{C.77}$$

Wir legitimieren jetzt die Aussage, dass man durch die S-Wellenstreuung für kleine Energie schon eine Hauptausgabe tätigen kann, oder anders gesprochen, dass für kleine Energien die Zentrifugalbarriere so groß wird, dass die Wellenfunktion für $l > 0$ das Streuzentrum nicht spührt. Dafür entwickeln wir (C.77) nochmal für kleine k und erhalten die Information

$$\delta_l \propto k^{2l+1} \tag{C.78}$$

Für kleine Energien tragen wie schon erwähnt nur die S-Wellen zur Streuung bei. Der totale Wirkungsquerschnitt lautet dabei

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(\delta_0) = 4\pi a^2 \tag{C.79}$$

Dafür wurde im letzten Schritt das Ergebnis aus (C.76) und die Tatsache kleiner k verwendet.

I Atomstruktur

1.1 Dirac-Gleichung, Elektronenspin und Feinstruktur

Die Schrödingergleichung ist nicht relativistisch, d.h. der Spin muss nachträglich eingeführt werden.

Dirac Einführung eines *relativistischen Hamiltonoperators* \hat{H} in die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi$$

wobei \hat{H} nur eine einfache Ortsableitung enthält, da in der Relativitätstheorie Ort und Zeit in gleicher Beziehung zu einander stehen, muss der Impuls p in \hat{H} linear sein. Es bietet sich folgender Ansatz an:

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta m_0 c^2 \tag{1.1}$$

$\boldsymbol{\alpha}$ und β sind dimensionslos und sind zu bestimmen. \times

Die *relativistische Energie-Impuls Beziehung* lautet:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \tag{1.2}$$

Bemerkung: Im Grenzfall gilt:

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad \text{mit} \quad p^2 c^2 \ll m_0^2 c^4$$

$$= m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2 c^2}{m_0^2 c^4}}$$

$$\approx m_0 c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_0^2 c^2} \right)$$

$$= m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0}$$

\rightarrow

Ähnlich der Energie-Impuls Beziehung wird der Ansatz des relativistischen Hamiltonoperators quadriert, um anschließend einen Koeffizientenvergleich machen zu können:

$$\hat{H}^2 = c^2 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + m_0 c^3 (\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} \beta) + \beta^2 m_0^2 c^4$$

Der Koeffizientenvergleich mit Gleichung (1.2) liefert:

$$p^2 c^2 = c^2 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 \tag{1.3}$$

$$0 = m_0 c^3 (\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} \beta) \tag{1.4}$$

$$m_0^2 c^4 = \beta^2 m_0^2 c^4 \tag{1.5}$$

Aus Gleichung (1.5) folgt:

$$\beta \neq 0 \quad \beta^2 = 1.$$

Aus Gleichung (1.4) folgt, dass α und β keine c-Zahlen sind sondern:

$$\boxed{\beta \cdot \alpha + \alpha \cdot \beta = 0} \quad \text{da} \quad \hat{p}\beta = \beta\hat{p}$$

Aus Gleichung (1.3) folgt:

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 &= (\alpha \cdot \hat{p})^2 \\ &= (\alpha \cdot \hat{p})(\alpha \cdot \hat{p}) \\ &= \left(\sum_i \alpha_i \hat{p}_i \right) \left(\sum_k \alpha_k \hat{p}_k \right) \end{aligned}$$

Explizites ausführen der Summen liefert:

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 &= \alpha_1 \alpha_1 \hat{p}_1 \hat{p}_1 + \alpha_1 \alpha_2 \hat{p}_1 \hat{p}_2 + \alpha_1 \alpha_3 \hat{p}_1 \hat{p}_3 + \alpha_2 \alpha_1 \hat{p}_2 \hat{p}_1 \\ &\quad + \alpha_2 \alpha_2 \hat{p}_2 \hat{p}_2 + \alpha_2 \alpha_3 \hat{p}_2 \hat{p}_3 + \alpha_3 \alpha_1 \hat{p}_3 \hat{p}_1 + \alpha_3 \alpha_2 \hat{p}_3 \hat{p}_2 + \alpha_3 \alpha_3 \hat{p}_3 \hat{p}_3 \end{aligned}$$

Da $\hat{p}_i \hat{p}_k = \hat{p}_k \hat{p}_i$ gilt:

$$\begin{aligned} &= \sum_{k,i=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha_k \alpha_i + \alpha_i \alpha_k) \hat{p}_i \hat{p}_k \\ &= \sum_{k,i=1}^3 \delta_{ik} \hat{p}_i \hat{p}_k \\ &= \hat{p}^2 \end{aligned}$$

Aus Gleichung (1.3) erhalten wir somit:

$$\boxed{\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik}} \quad (1.6)$$

Insgesamt bedeutet dies, dass α_i und β Matrizen sein müssen, deren einfachste Lösungen

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix}, \quad \beta$$

sind 4×4 Matrizen. Mit Hilfe der *Pauli-Spin-Matrizen*

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

kann für α_i und β folgende Darstellung gefunden werden:

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}.$$

Optisches Theorem

Aus der Gleichung der Streuamplitude (C.54) bilden wir den Realteil für $\vartheta = 0$ und erhalten für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im}(f_k(0)) \quad (C.69)$$

Streuphasen

Im folgenden betrachten wir ein kurzreichweitiges Potential, welches für $r > a$ Null ist. Außerhalb dieses Bereiches lautet die Lösung der Radialgleichung

$$R_l^{\pm}(r) = \frac{1}{2} [h_l^*(kr) + e^{2i\delta_l} h_l(kr)] \quad (C.70)$$

Dabei ist $h_l(kr)$ die erste Hankelfunktion, also $h_l^{(1)}(kr)$ und $R_l^{\pm}(r)$ beschreibt die Funktion mit dem Radius $r > a$. Über die innere Radialfunktion R_l^{\pm} lässt sich ohne Wissen des Potentials keine Aussage machen, jedoch gelten die Anschlussbedingungen

$$R_l^{\pm}(r) \Big|_{r=a} = R_l^{\pm}(r) \Big|_{r=a} \quad (C.71)$$

$$\frac{d}{dr} R_l^{\pm}(r) \Big|_{r=a} = \frac{d}{dr} R_l^{\pm}(r) \Big|_{r=a} \quad (C.72)$$

Teilt man diese Bedingungen durcheinander und setzt voraus, dass sowohl die Ableitung, als auch die Wellenfunktion am Punkt $r = a$ endlich ist, ergibt sich

$$\left(\frac{R_l^{\pm}(r)}{\frac{d}{dr} R_l^{\pm}(r)} \right) \Big|_{r=a} = \left(\frac{R_l^{\pm}(r)}{\frac{d}{dr} R_l^{\pm}(r)} \right) \Big|_{r=a} = \alpha_l \quad (C.73)$$

Für unsere Wellenfunktion führt dies nach einigen Umformungen auf den Ausdruck

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} [h_l^*(kr) + e^{2i\delta_l} h_l(kr)] \right) \cdot \frac{1}{h_l^*(kr) + e^{2i\delta_l} h_l(kr)} \Big|_{r=a} &= \alpha \\ \left(\frac{2 \left(\frac{d}{dr} [j_l(kr)] - \alpha_l j_l(kr) \right) - \alpha_l h_l(kr) - \frac{d}{dr} [h_l(kr)]}{\alpha_l h_l(kr) - \frac{d}{dr} [h_l(kr)]} \right) \Big|_{r=a} &= e^{2i\delta} - 1 \\ \left(\frac{\frac{d}{dr} [n_l(kr)] - \alpha_l n_l(kr)}{\frac{d}{dr} [j_l(kr)] - \alpha_l j_l(kr)} \right) \Big|_{r=a} &= \cot(\delta_l) \end{aligned} \quad (C.74)$$

Als Anwendungsbeispiel betrachten wir eine harte Kugel mit Radius a . Die Wellenfunktion muss dann am Punkt $r = a$ auf Null abgefallen sein und Gleichung (C.73) ergibt dementsprechend $\alpha_l = \infty$

$$\lim_{\alpha_l \rightarrow \infty} \left(\frac{\frac{d}{dr} [n_l(kr)] - \alpha_l n_l(kr)}{\frac{d}{dr} [j_l(kr)] - \alpha_l j_l(kr)} \right) \Big|_{r=a} = \cot(\delta_l) \quad (C.75)$$

$$\frac{n_l(ka)}{j_l(ka)} = \cot(\delta_l)$$

Aus (C.55) erhalten wir dann einen Ausdruck des differentiellen Wirkungsquerschnitts

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{dN(\Omega)}{N_{\text{ein}} d\Omega} \\ &= \frac{|f_{k_0}|^2 d\Omega}{\hbar k_0} \frac{\hbar k_0}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt |\psi_{0,r}|^2 \\ &= \frac{\hbar k_0}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt |\psi_{0,\text{quelle}}|^2 d\Omega \\ &= |f_{k_0}|^2 \end{aligned} \tag{C.62}$$

Es wurde hier jedoch angenommen, dass sich die Breite des Wellenpaketes sich nicht mit dem Abstand von der Quelle ändert, anders gesprochen

$$|\psi_{0,\text{quelle}}|^2 = |\psi_{0,r}|^2$$

Den totalen Streuquerschnitt, bzw. der gesamte Wirkungsquerschnitt entsteht durch Integration über $d\Omega$

$$\sigma = \int d\Omega |f_{k_0}|^2 \tag{C.63}$$

Für unsere Streuamplitude (C.54) lautet der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l,r} (2l+1)(2l+1) e^{i(\delta_l - \delta_r)} \sin(\delta_l) P_l(\cos(\vartheta)) P_r(\cos(\vartheta)) \tag{C.64}$$

Es treten also Interferenz-Beiträge der Form $\delta_l - \delta_r$ auf. Im totalen Streuquerschnitt verschwinden diese jedoch.

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin(\delta_l)^2 \tag{C.65}$$

Dies folgt unmittelbar aus der Eigenschaft der Legendre-Polynome

$$\int d\Omega P_l(\cos(\vartheta)) P_r(\cos(\vartheta)) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,r}. \tag{C.66}$$

Für die S -Wellenstreuung mit $l = 0$ erhalten wir den maximalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{\text{max}}(l = 0) = \frac{4\pi}{k^2}. \tag{C.67}$$

Der Beitrag jeder einzelnen Partialwelle in (C.65) ist dabei $\leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$, wobei das Maximum (Gleichheitszeichen) dann erreicht wird, falls $\delta_l = n + \frac{\pi}{2}$ ist. Zudem tragen in der Summe (C.65) nur diejenigen l bei, welche die Bedingung $l \leq ka$ erfüllen. Wobei a die Reichweite des Potentials widerspiegelt. Für Abstände $r > a$ wirkt nur das Zentrifugalpotential $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$. Im

klassischen Sinne würde der Umkehrradius bei $r_{kl} = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k}$ liegen. Für Abstände die kleiner sind als der klassische Umkehrradius $r < r_{kl}$ erfährt die Wellenfunktion einen exponentiellen Abfall. Das heißt ist $r_{kl} > a$, so spürt die Wellenfunktion kein Potential. Die Bedingung für eine Streuung ist also

$$r_{kl} \leq a \quad \sqrt{l(l+1)} \approx l \leq ka \tag{C.68}$$

Konsequenz: Die Wellenfunktion ψ hat 4 Komponenten, d.h.

$$\alpha = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Interpretation:

Wir betrachten stationäre Lösungen, d.h. es wird folgender Ansatz verwendet:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t = 0) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

und in die Dirac-Gleichung eingesetzt. Dies führt zur **stationären Dirac-Gleichung**:

$$\boxed{(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta m_0 c^2) \psi = E\psi} \tag{1.7}$$

Für ψ verwenden wir hierbei die Darstellung:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad \text{wobei} \quad \psi_A = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_B = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Dies bezeichnet man auch als **Dirac-Spinoren**. ψ_A repräsentiert hierbei ein Teilchen und ψ_B das dazugehörige Antiteilchen. Die Interpretation Diracs folgte durch die Theorie des sog. **Dirac-See**. Dabei wird bei einer Paarbildung (z.B. Elektron und Positron) ein Teilchen aus dem Bereich negativer Energie angehoben, sodass ein Loch im negativen Energiebereich entsteht. Dieses Loch spiegelt das Antiteilchen wider. Mit Hilfe der Spinoren erhalten wir das DGL-System:

$$\boxed{(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}) \psi_B = \frac{1}{c} (E - m_0 c^2) \psi_A} \tag{1.8}$$

$$\boxed{(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}) \psi_A = \frac{1}{c} (E + m_0 c^2) \psi_B} \tag{1.9}$$

$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ entspricht hierbei einen Vektor mit den Pauli-Matrizen als Komponenten.

Bemerkung: Durch das Skalarprodukt $(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p})$ manifestiert sich bereits hier die Spin-Bahn-Kopplung.

Für ein ruhendes Teilchen $\mathbf{p} \psi_{A,B} = 0$ erhalten wir:

- ▶ zwei Lösungen zur positiven Energie $E = mc^2$:

$$\psi_A = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \psi_B = 0$$

- ▶ zwei Lösungen zur negativen Energie $E = -mc^2$:

$$\psi_B = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \psi_A = 0$$

Der Spinor ψ_A entspricht somit Teilchen mit zwei »Arten« (Spininstellungen). Der Spinor ψ_B hingegen entspricht Antiteilchen mit zwei »Arten« (Spininstellungen).

1.1.1 Der Spin des Elektron

Wir betrachten zunächst den Operator:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}.$$

Er erfüllt die Kommutatorrelation für Drehimpulse:

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k$$

Wirkt zum Beispiel \hat{S}_z auf einen Eigenzustand, so erhalten wir dessen Spin:

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} = \uparrow \quad \hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} = \downarrow$$

Kommutatorrelationen Es gelten folgende Relationen (Beweis siehe Anhang A):

$$[\hat{S}, \hat{H}_D] = -i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \quad (1.10)$$

$$[\hat{L}, \hat{H}_D] = i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \quad (1.11)$$

$$[\hat{L} + \hat{S}, \hat{H}_D] = [\hat{J}, \hat{H}_D] = 0 \quad (1.12)$$

BEWEIS. Es soll im folgenden für eine Komponente von Gleichung (1.10) der Beweis geführt werden, für die anderen gilt analoges Vorgehen.

$$\begin{aligned} [S_x, H_D] &= \left[\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}, \frac{\hbar c}{1} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 \right] \\ &= \frac{c\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \sigma_x \\ \sigma_x \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \sigma_x & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{c\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y p_z + \sigma_z p_y \\ \sigma_y p_z + \sigma_z p_y & 0 \end{pmatrix} \\ &= -i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p})_x \end{aligned}$$

Rest siehe Übungsaufgaben. ■

und damit auf die endgültige Streuamplitude

$$f_k(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos\boldsymbol{\theta}) \quad (C.54)$$

Die physikalische Bedeutung von δ_l ist dabei schnell erklärt, sie beschreibt die Phasenverschiebung der gestreuten Welle zur Situation einer auslaufenden Welle, welche nicht gestreut wird.

Differentieller Wirkungsquerschnitt

Im vorherigen Abschnitt haben wir mit vielen Näherungen und unter viel Aufwand einen Ausdruck der Streuamplitude hergeleitet, doch wozu benötigen wir diese überhaupt? Dazu machen wir uns zunächst mit dem differentiellen Wirkungsquerschnitt vertraut. Dieser gibt an, wie viele Teilchen in ein Winkелеlement $d\Omega$ um Ω gestreut werden. Oder anders ausgedrückt, wie ist das Verhältnis aller einfallenden Teilchen zu den ausfallenden Teilchen in einem bestimmten Raumbereich,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN(\Omega)}{N_{\text{ein}} d\Omega}. \quad (C.55)$$

Mit der allgemeinen Definition der Stromdichte

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \approx \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{m} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (C.56)$$

Lassen sich die einfallenden und ausfallenden Teilchen wie folgt ausdrücken

$$N_{\text{ein}} = \int dt j_{\text{ein}} \quad dN(\Omega) = \int dt j_r r^2 d\Omega \quad (C.57)$$

Mit der Näherung aus (C.56) erhalten wir für die einfallenden Teilchenzahl

$$N_{\text{ein}} = \frac{\hbar k_0}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (C.58)$$

Um die auslaufende Teilchenzahl zu bestimmen betrachten wir zuerst einmal die Nebenrechnung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi_0 &= \frac{\partial}{\partial r} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_0 r} a_{\mathbf{k}} e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar} \\ &= ik_0 \psi_0 \end{aligned} \quad (C.59)$$

Es wurde hierbei die allgemeine Streuwellenfunktion aus (C.23) verwendet und die Ebenenwellen durch die Entwicklung aus (C.1) ersetzt. Für die radiale Stromdichte folgt nun

$$j_r = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\frac{f^*}{r} \psi_0^* \frac{\partial}{\partial r} \frac{f}{r} \psi_0 \right) = \frac{\hbar k_0}{m} \frac{|f_{k_0}|^2}{r^2} |\psi_0|^2 \quad (C.60)$$

und damit

$$dN(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt j_r r^2 d\Omega = |f_{k_0}|^2 d\Omega \frac{\hbar k_0}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt |\psi_0|^2 \quad (C.61)$$

Die Lösung ist gegeben durch eine Summe aus sphärischen Hankelfunktionen $h_l^{(n)}$, auf die hier nicht weiter eingegangen wird. Die wichtige Information ist ihr asymptotisches Verhalten für große Abstände r . Hierfür gelten die folgenden Beziehungen

$$h_l^{(1)}(kr) \propto \frac{-ie^{i(kr-kr)}}{kr} \quad h_l^{(2)}(kr) \propto \frac{ie^{-i(kr-kr)}}{kr} \quad (C.47)$$

Die erste Hankelfunktion entspricht einer einlaufenden, die zweite einer auslaufenden Kugelwelle. Durch Gleichsetzen von (C.46) und (C.39) erhält man Aufschluss über den Koeffizienten B_l

$$B_l = \frac{1}{2} \quad (C.48)$$

Der noch zu bestimmende Koeffizient $S_l(E)$ kann im Rahmen der allgemeinen Streutheorie durch Bestimmung der Eigenwerte der Streumatrix S bestimmt werden. Wir können ihn jedoch auch anders bestimmen. Dazu betrachten wir die Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstromes, denn klar ist, dass die Potentialstreuung elastisch ist, d.h. jedes einfallende Teilchen muss auch wieder herauskommen. Jede einzelne Partialwelle muss also die Eigenschaft aufzeigen, dass seine radiale-Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j_r = 0$ sein muss. Anders gesprochen, in einer fiktiven Kugelschale mit dem Radius R müssen genauso viele Teilchen einlaufen wie auslaufen. Dies führt auf eine Unitarität, das heißt die Summe der Eigenwerte aus der Streumatrix müssen $|1|$ ergeben. Was unseren Koeffizienten an die Bedingung $|S_l(E)| = 1$ kettet. Diese Forderung lässt sich auch aus der Definition des Wahrscheinlichkeitsstromes herleiten.

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(R_l^* \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ &= \frac{\hbar k}{m} \operatorname{Im} (h_l h_l^* + |S_l(e)|^2 h_l^* h_l + 2 \operatorname{Re} (h_l S_l h_l^*)) \\ &\approx -\frac{\hbar}{m k r^2} (1 - |S_l(e)|^2) \end{aligned} \quad (C.49)$$

Durch Ausnutzung von (C.47) und Vernachlässigung von $|P_l(\cos(\vartheta))|^2$. Unser Koeffizient lautet nun trivialerweise

$$S_l(E) = e^{2i\delta_l(E)} \quad (C.50)$$

Wobei wir problemlos $S_l(E) = S_l(k)$ schreiben können, da die Energie direkt mit k in Verbindung steht. Unsere Lösung der Radialgleichung ist damit gegeben durch

$$R_l(r) = \frac{1}{2} (h_l^{(2)}(kr) + e^{2i\delta_l(E)} h_l^{(1)}(kr)) \quad (C.51)$$

Verwenden wir nun wiederum das asymptotische Verhalten der Hankelfunktionen aus (C.47) und setzen unsere Radiallösung in (C.44) ein, so ergibt sich

$$\psi_k \approx \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos(\vartheta)) \frac{i^{l(2l+1)}}{2ikr} (e^{i(kr-l\frac{\pi}{2}+2\delta_l)} - e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})}). \quad (C.52)$$

Ein letzter Koeffizientenvergleich mit (C.39) führt uns auf die Partialwellenamplituden

$$f_l(\vartheta) = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l} \sin(\delta_l)}{k} \quad (C.53)$$

Gleichung (1.10) zeigt, dass \hat{S} keine Erhaltungsgröße mehr ist, gleiches folgt für \hat{L} aus Gleichung (1.11). Die Summe beider Operatoren, also Gleichung (1.12) führt jedoch auf eine Erhaltungsgröße, den **Gesamtrehimpuls** mit den Quantenzahlen j und m_j .

Jetzt bleibt noch die Frage nach den **Gesamtrehimpulsfunktionen** (für \hat{L} sind dies die Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$). Im jetzigen Fall müssen die Eigenfunktionen somit zweikomponentig sein.

► **Beispiel** 1.) Sei $\ell = 0, j = \ell + 1/2, m_j = m_s = 1/2$:

$$|j = 1/2, m_j = 1/2\rangle = |l = 0, m_s = 1/2\rangle$$

m_s ist hier eine gute Quantenzahl, da keine Linearkombination der alten Zustände existiert.

2.) Sei $\ell = 1, j = \ell - 1/2, m_j = m_s = 1/2$:

$$|j = 1/2, m_j = 1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1, m_s = -1/2\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |m_l = 0, m_s = 1/2\rangle$$

m_s ist hierbei keine gute Quantenzahl mehr, da der Zustand des Gesamtdrehimpuls eine Linearkombination aus den Spinzuständen up und down ist. ◀

1.1.2 Das magnetische Moment des Elektron

Dirac-Regel

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (1.13) \quad \times$$

Um das magnetische Moment des Elektrons und dessen Landé Faktor zu bestimmen müssen Gleichung (1.8) und Gleichung (1.9) um den Term $e\mathbf{A}$ ergänzt werden, so das gilt:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\psi_B = \frac{1}{c}(E - m_0c^2)\psi_A \quad (1.14)$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\psi_A = \frac{1}{c}(E + m_0c^2)\psi_B \quad (1.15)$$

Für langsame Elektronen gilt die Näherung:

$$E \sim m_0c^2$$

weshalb die Klammern auf der rechten Seite sich zu $2m_0c^2$ reduzieren.

$$\psi_B = \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\psi_A + \mathcal{O}\left(\frac{v^2}{c^2}\right)$$

Eingesetzt in Gleichung (1.14) ergibt sich:

$$\frac{1}{c}(E - mc^2)\psi_A = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\psi_A$$

Mittels Gleichung (1.13) folgt:

$$\frac{1}{c}(E - mc^2)\psi_A = [(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \underbrace{(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A})}_{(*)}] \psi_A$$

Hierbei gilt zu beachten, dass

$$[\mathbf{p}, \mathbf{A}] \neq 0.$$

Damit wird (*) zu:

$$(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) = e\hbar \operatorname{rot} \mathbf{A}.$$

Der Dirac-Hamiltonoperator \hat{H}_D geht im Falle langsamer Elektronen in den *Pauli-Hamiltonoperator* \hat{H}_P über.

$$\hat{H}_P = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \mathbb{1} + \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (1.16)$$

Daraus folgt das *magnetische Moment des Elektrons* und der *Landé-Faktor*:

$$\mu_s = \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} = \underbrace{\frac{2}{\hbar}}_{=g} \frac{\mu_B}{S}$$

g ist hierbei der Landé-Faktor (im Grenzfall langsamer Geschwindigkeiten).

1.1.3 Das Wasserstoffatom in der Dirac-Theorie

Im Folgenden wollen wir die Energielevels und die Wellenfunktionen des relativistischen Wasserstoffatoms berechnen. Für das Potential gilt das bekannte Zentralpotential (Coulomb-Potential)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1.17)$$

wobei Z die Kernladungszahl ist. Mit der Dirac-Gleichung die um ein Potentialterm erweitert wird

$$H_D = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + V(r) \cdot \mathbb{1}$$

und Gleichung 1.17 gilt es folgende stationäre Dirac-Gleichung in Matrixform zu lösen

$$\begin{pmatrix} V(r) + mc^2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & V(r) - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (1.18)$$

Die Koeffizienten f_l werden oft auch Partialwellenamplituden genannt. Unter all diesen Näherungen lässt sich unsere Wellenfunktion beschreiben durch

$$\psi_{kl}(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k^r} P_l(\cos(\vartheta)) \left[\frac{1}{2l} \left(e^{il(kr - \frac{t}{\hbar})} - e^{-i(kr - \frac{t}{\hbar})} \right) + k f_l e^{ikr} \right]. \quad (C.39)$$

Für ein rotationssymmetrisches Potential findet sich, wie im bekannten Beispiel des Wasserstoffatoms, ein Separationsansatz. Die Lösung besteht dann aus den Kugelflächenfunktionen und einem Radialteil

$$\psi = R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (C.40)$$

Für beliebiges Potential $V(r)$ lautet die Differentialgleichung des Radialteils

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] r R_l(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) R_l(r). \quad (C.41)$$

Wobei wir diese Gleichung auch Umformen können

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - V_{eff}(r) \right] r R_l(r) = -k^2 R_l(r). \quad (C.42)$$

Dabei haben wir das Effektive Potential eingeführt, welches die Form

$$V_{eff}(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \quad (C.43)$$

annimmt. Evident ist, dass das Effektive-Potential stark von der Drehimpulsquantenzahl l abhängt. Man spricht hier auch von der sog. Zentrifugalbarriere. Für die S -Wellenstreuung ist $l = 0$ und es gilt

$$V_{eff} \propto V(r)$$

Angenommen wir kennen die Lösung aus (C.41) für unsere Radialgleichung, so können wir unsere stationäre Wellenfunktion nach diesen Radialfunktionen und den Kugelflächenfunktionen entwickeln

$$\psi_k(r) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (C.44)$$

Für den Fall, großer Entfernung zum Streuer, lässt sich das Potential aus (C.41) mit $V(r) = 0$ annähern. Da Streupotentiale zumeist die Form

$$V(r) \propto \frac{1}{r^u} \quad u \geq 1 \quad (C.45)$$

annehmen. Für den Fall weiter Entfernung lautet die Lösung der Radialgleichung

$$R_l(r) = B_l \left(h_l^{(2)}(kr) + S_l(E) \right) h_l^{(1)}(kr) \quad (C.46)$$

ergibt sich nach Multiplikation von $P_l(\cos(\vartheta))$ und Integration über ϑ

$$A_l j_l(kr) = \frac{[4\pi(2l+1)]^{1/2}}{2} \int_0^\pi d\vartheta P_l(\cos(\vartheta)) e^{ikr \cos(\vartheta)} \quad (\text{C.31})$$

$$A_l j_l(kr) = \frac{[4\pi(2l+1)]^{1/2}}{2} \int_{-1}^1 dz P_l(z) e^{ikrz}$$

Für den Fall $m \leq 0$ lassen sich die Legendre-Polynome auch Umschreiben

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (\text{C.32})$$

Durch mehrfacher Verwendung der Orthogonalrelation (C.30) und (C.32) erhalten wir

$$\int_{-1}^1 dz P_l(z) e^{ikrz} = \int_{-1}^1 dz P_l(z) \left[\sum_{l'=0}^{\infty} \frac{(ikrz)^{l'}}{l!} \right] = (ikr)^l \frac{2^l l!}{(2l)!} \int_{-1}^1 dz P_l(z) P_l(z) + O[(kr)^{l+1}] \quad (\text{C.33})$$

Auf der linken Seite müssen wir die Bessel-Funktion für kleine r nähern. Diese verhält sich im Grenzfall wie folgt

$$\lim_{x \rightarrow 0} j_l(x) = \frac{x^l}{1 \cdot 2 \cdot 3 \dots (2l+1)}. \quad (\text{C.34})$$

Setzen wir beide Seiten gleich, unter der Näherung kleiner r erhalten wir, einen Ausdruck für die Koeffizienten A_l

$$A_l \frac{2^l l!}{(2l+1)!} (kr)^l = (ikr)^l \frac{2^l l!}{(2l)!} \int_{-1}^1 dz P_l(z) P_l(z) \quad (\text{C.35}$$

$$A_l = i^l [4\pi(2l+1)]^{1/2}.$$

Unsere Reihenentwicklung, auch Partialwellenentwicklung genannt, lautet somit

$$e^{ik \cdot r} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos(\vartheta)). \quad (\text{C.36})$$

Außerdem erhalten wir zusätzlich die Integraldarstellung der Besselfunktionen

$$j_l(x) = \frac{(-1)^l}{2} \int_{-1}^1 dz P_l(z) e^{ixz}. \quad (\text{C.37})$$

Da unsere Entwicklung der Ebenen Welle, unter der Voraussetzung, dass sich die einfallende Welle in z -Richtung ausbreitet, unabhängig vom Azimutalwinkel ist, muss auch die Streuamplitude invariant unter einer Drehung um die z -Achse sein. Es muss also gelten

$$f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) = f_{\mathbf{k}}(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos(\vartheta)). \quad (\text{C.38})$$

Um zu erkennen ob eine Separation in Radial- und Winkelanteil günstig ist, überprüfen wir den Term $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ auf seine Symmetrie in dem wir uns der Dirac-Identität und Kugelkoordinaten bemächtigen.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} &= \mathbb{1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ &= \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r} \right) \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r} \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ &= \frac{1}{r^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}) (-i\hbar \mathbf{r} \cdot \nabla + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}) \\ &= \frac{1}{r} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}) \left[-i\hbar \partial_r + i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}}{r} \right] \end{aligned}$$

Es zeigt sich, dass der Term $-i\hbar \partial_r$ nur auf den Radialanteil und

$$i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} = \frac{1}{\hbar} (j^2 - \ell^2 - s^2)$$

nur auf den Winkelanteil wirkt. Eine Separation in Radial- und Winkelanteil erleichtert somit das vorgehen. Für die weitere Rechnung wird noch die Kenntnis über die Wirkung von $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}$, bzw. $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}$ auf die Eigenzustände $\chi_{jm_j}^\pm$ (die Unterscheidung zwischen $+$ und $-$ beruht auf den zwei verschiedenen Möglichkeiten bei vorgegebener Quantenzahlen j des Bahndrehimpulses $\boldsymbol{\ell}$ und des Elektronenspins $s = 1/2$ zu kombinieren).

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}) \chi_{jm_j}^\pm &= \frac{1}{\hbar} (j^2 - \ell^2 - s^2) \chi_{jm_j}^\pm \\ &= \hbar [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \chi_{jm_j}^\pm \\ &\stackrel{\ell=0}{=} 0 \end{aligned}$$

Wir wissen, dass $\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r}$ ein Skalar ist, dass die Relation $\left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r} \right)^2 = \mathbb{1}_{2 \times 2}$ erfüllt. Da $\left[\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r}, \mathbf{j}^2 \right] = 0$ folgt dass $\chi_{jm_j}^\pm$ auch Eigenfunktionen zu $\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r}$ sind. Bei Raumversionen gilt

$$\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r} \implies \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r} \rightarrow -\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r}.$$

D.h. $\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r}$ hat ungerade Parität. Es folgt somit

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r})}{r} \chi_{jm_j}^\pm = -\chi_{jm_j}^\pm.$$

Im folgenden ist $P(\ast)$ der *Paritätsoperator*.

$$\begin{aligned} P(\chi_{jm_j}^\pm) &= \chi_{jm_j}^\pm(-\mathbf{r}) \\ &= (-1)^l \chi_{jm_j}^\pm \end{aligned}$$

Explizite Darstellung

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r} &= \frac{1}{r} \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Für die Lösung der stationäre Dirac-Gleichung

$$\begin{pmatrix} V(r) + mc^2 & c\sigma_r(-ih\partial_r + i\frac{\sigma \cdot \mathbf{k}}{r}) \\ c\sigma_r(-ih\partial_r + i\frac{\sigma \cdot \mathbf{k}}{r}) & V(r) - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$$

verwenden wir den Ansatz

$$\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r)\chi_{jm_j}^{\pm}(\theta, \phi) \\ iG(r)\chi_{jm_j}^{\mp}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (1.1.19)$$

Der Lösungsansatz führt uns auf die Separation in Winkel- und Radialanteil. Die Lösung des Winkelanteils ist hier bereits erledigt, da diese durch $\chi_{jm_j}^{\pm}$ gegeben ist. Einsetzen in Gleichung 1.1.19 führt auf zwei gekoppelte Differentialgleichungen.

$$c \left[ih\partial_r - i\frac{\hbar}{r} \left(-1 \mp \left(j + \frac{1}{2} \right) \right) \right] G \chi_{jm_j}^{\pm} = (E - mc^2 - V) F \chi_{jm_j}^{\pm} \quad (1.1.20)$$

$$c \left[ih\partial_r - i\frac{\hbar}{r} \left(-1 \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \right) \right] F \chi_{jm_j}^{\mp} = (E + mc^2 - V) iG \chi_{jm_j}^{\mp} \quad (1.1.21)$$

Es folgen zwei Gleichungssysteme für den Radialteil (nur für (+)).

$$c\hbar \left[-\partial_r - \frac{1}{r} \left(j + \frac{3}{2} \right) \right] G = (E - mc^2 - V) F \quad (1.1.22)$$

$$c\hbar \left[\partial_r - \frac{1}{r} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right] F = (E + mc^2 - V) G \quad (1.1.23)$$

Dies führt nur auf sinnvolle Lösungen für $Z < 137$. Für die Energieeigenwerte folgt somit.

$$E(n, j) = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j+1/2) + \sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2}} \quad (1.1.24)$$

α entspricht hierbei der *Feinstrukturkonstante*

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (1.1.25)$$

Entwickeln wir dieses Ergebnis in Potenzen von α so erhalten wir

$$E(n, j) \approx mc^2 \left[1 - \frac{1}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) + \mathcal{O}(\alpha^5) \right]$$

1.2 Feldquantisierung

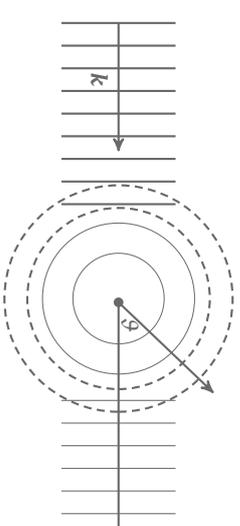
Die *Maxwellgleichungen* im Vakuum sind gegeben durch

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}} \quad (1.1.26)$$

$$\text{rot } \mathbf{B} = \mu_0 \epsilon_0 \dot{\mathbf{E}} \quad (1.1.27)$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0 \quad (1.1.28)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = 0 \quad (1.1.29)$$



► 102 Streuung Ebener Wellen an einem Zentrum

Partialwellen

Wir beschränken uns nun auf den Spezialfall eines radialsymmetrischen Potentials. Das heißt $V(r) = V(r)$. Unter dieser Voraussetzung an unser Streupotential entwickeln wir (C.23) nach Kugelflächenfunktionen. Ebene Wellen können immer in Kugelflächenfunktionen entwickelt werden, da die Lösungen der Schrödingergleichung eines freien Teilchens in sphärischen Koordinaten gegeben ist durch

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_{l,m}(\mathbf{k}) j_l(kr) Y_{l,m}. \quad (C.26)$$

Da wir wissen, dass Ebene Wellen auch Lösungen von freien Teilchen sind, machen wir den Ansatz

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} c_{l,m}(\mathbf{k}) j_l(kr) Y_{l,m} \quad (C.27)$$

Dabei beschreiben $j_l(kr)$ die Besselfunktionen. Zu bestimmen sind nun noch die unbekannten Koeffizienten $c_{l,m}(\mathbf{k})$. Da es sich um sphärische Koordinaten handelt, können wir den \mathbf{k} -Vektor in die z -Richtung legen. Das heißt der Exponent der linken Seite wird zu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos(\vartheta)$ was uns eine φ unabhängig liefert. Da nur die Kugelflächenfunktionen mit $m = 0$ unabhängig vom Azimutwinkel sind, können wir die zweite Summe in (C.27) eingrenzen. Zudem lassen sich die Kugelflächenfunktionen mit $m = 0$ auch durch die Legendre-Polynome ausdrücken

$$Y_{l,0} = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_l(\cos(\vartheta)) \quad (C.28)$$

Unser Problem reduziert sich auf die Gleichung

$$e^{i\mathbf{k}r \cos(\vartheta)} = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} A_l j_l(kr) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (C.29)$$

Unter Ausnutzung der Orthogonalitätsbedingung der Legendre-Polynome

$$\int_0^{\pi} d\vartheta P_l(\cos(\vartheta)) P_{l'}(\cos(\vartheta)) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1} \quad (C.30)$$

Dabei ist z_0 die Polstelle $\frac{k-i\epsilon}{2}$. Unser Residuum lautet also

$$\begin{aligned} \text{Res} &= -\frac{1}{4i\pi^2 r} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{q e^{iqr}}{2q} \Big|_{q = \frac{k-i\epsilon}{2}} \\ &= -\frac{1}{4i\pi^2 r} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2} e^{ir \frac{k-i\epsilon}{2}} \\ &= -\frac{1}{4i\pi^2 r} \frac{e^{ikr}}{2} \end{aligned} \tag{C.17}$$

Das Ergebnis des Integrals (C.15) erhalten wir durch Multiplikation von $2\pi i$ mit seinem Residuum. Das heißt unsere retardierte Greensfunktion ist gegeben durch

$$\begin{aligned} G(\mathbf{y}) &= -2\pi i \frac{1}{4i\pi^2 r} \frac{e^{ikr}}{2} \\ G(\mathbf{y}) &= -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} \\ G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned} \tag{C.18}$$

Zurück zu unserem eigentlichen Streuproblem. Die homogene Lösung wird beschrieben durch ebene Wellen und mit Hilfe von (C.18) lässt sich unsere Wellenfunktion angeben

$$\psi_k = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}'} d^3\mathbf{r}' \tag{C.19}$$

Im allgemeinen sind die Streuer weit entfernt von den Detektoren, d.h. $|\mathbf{r}'| \gg |\mathbf{r}''|$. Damit lässt sich folgende Entwicklung legitimieren.

$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}' + r'^2} \tag{C.20}$$

$$\approx kr - k\frac{\mathbf{r}}{r}\cdot\mathbf{r}' = kr - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}' \tag{C.21}$$

Wobei wir die Definition $\mathbf{k}' = k\frac{\mathbf{r}}{r}$ verwendet haben. Gleichung (C.19) kann unter der Abkürzung der Streuamplitude

$$f_k(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}'} d^3\mathbf{r}', \tag{C.22}$$

in weiter Entfernung vom Streuer beschrieben werden als

$$\psi_k = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\vartheta, \varphi). \tag{C.23}$$

Im Folgenden wird die Zeitentwicklung der Streuwelle beschrieben, dazu verwenden wir (C.23) und setzen unsere bekannte Form der Zeitabhängigkeit aus (C.5) ein.

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A_{\mathbf{k}} \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - E_{\mathbf{k}}(t-t_0))/\hbar}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \tag{C.24}$$

Mit

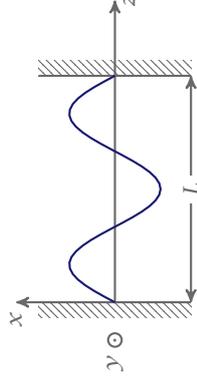
$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - iE_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar}. \tag{C.25}$$

Aus ihnen folgt die Wellengleichung

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \mathbf{E} \tag{1.30}$$

Lösungen von Gleichung 1.30 sind mitunter gegeben durch

$$E = A \sin(kz - \omega t + \phi)$$



► 1 EM-Feld in einer eindimensionalen Cavity

Elektromagnetisches Feld in einer eindimensionalen Cavity: Im folgenden wollen wir Abbildung 1 betrachten. Sei die Polarisierung in x -Richtung, so gilt

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_x(z, t) \mathbf{e}_x.$$

Also

$$E_x(z, t) = \sqrt{\frac{2\omega^2}{V\epsilon_0}} q(t) \sin(kz)$$

V entspricht hier der Länge der eindimensionalen Cavity, $q(t)$ ist ein zeitabhängiger Faktor mit der Einheit einer Länge. Für das Magnetfeld gilt hierbei

$$B_y(z, t) = \left(\frac{\mu_0 \epsilon_0}{k}\right) \sqrt{\frac{2\omega^2}{V\epsilon_0}} \dot{q}(t) \cos(kz).$$

\dot{q} entspricht hierbei dem kanonischen Impuls, also

$$p(t) = \dot{q}(t).$$

Die klassische Feldenergie ist dementsprechend die gesuchte Hamiltonfunktion.

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int \left[\epsilon_0 E_x^2(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\mu_0} B_y^2(\mathbf{r}, t) \right] dV \\ &= \frac{1}{2} \int_0^L \left[\epsilon_0 E_x^2(z, t) + \frac{1}{\mu_0} B_y^2(z, t) \right] dz \\ &= \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2) \end{aligned}$$

Dies entspricht dem harmonischen Oszillator mit einer Masse von $m = 1$.



Das elektrische Feld übernimmt also hier die Stelle eines Ortes ein, und das magnetische Feld die eines Impulses. Somit erfolgt eine Quantisierung des Lichtfeldes

$$\mathbf{q} \rightarrow \hat{q}$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \hat{p}$$

wobei

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.31)$$

Das elektrische und das magnetische Feld sind somit Operatoren

$$\hat{E}_x = \sqrt{\frac{2\omega^2}{V\epsilon_0}} \hat{q}(t) \sin(kz) \quad (1.32)$$

$$\hat{B}_y = \frac{\mu_0\epsilon_0}{k} \sqrt{\frac{2\omega^2}{V\epsilon_0}} \hat{p}(t) \cos(kz) \quad (1.33)$$

Die Beschreibung des Feldes erfolgt durch nicht hermitesche Operatoren. In Anlehnung an den quantenmechanischen harmonischen Operator sind dies \hat{a} und \hat{a}^\dagger (Glauber).

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega}} (\omega\hat{q} + i\hat{p})$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega}} (\omega\hat{q} - i\hat{p})$$

Theorem Für den Kommutator der Leiteroperatoren, bzw. Glauberoperatoren gilt

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (1.34)$$

Damit lassen sich elektrische und magnetisches Feld umschreiben

$$\hat{E}_x \sim \hat{a} + \hat{a}^\dagger$$

$$\hat{B}_y \sim i(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

Bemerkung: Für das quantisierte elektrische und magnetische Feld in einer Dimension gilt

$$\hat{E}_x(z, t) = \mathcal{E}_0(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \sin(kz)$$

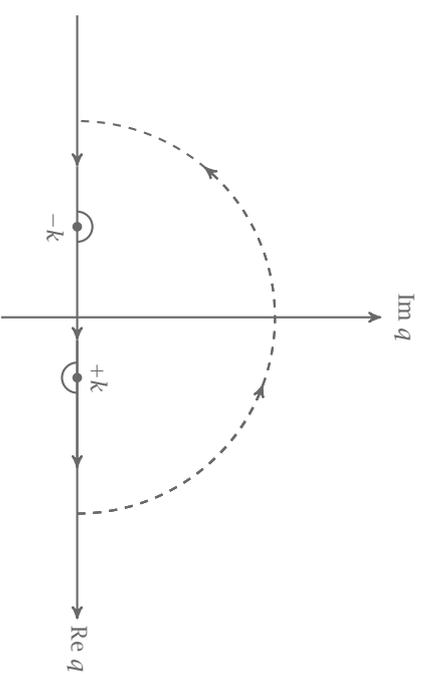
$$\hat{B}_y(z, t) = \mathcal{B}_0(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \cos(kz)$$

wobei für \mathcal{E}_0 und \mathcal{B}_0

$$\mathcal{E}_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}}$$

$$\mathcal{B}_0 = \left(\frac{N_0}{k}\right) \sqrt{\frac{\epsilon_0 \hbar \omega^2}{V}}$$

gilt. \mathcal{E}_0 und \mathcal{B}_0 können hierbei als elektrisches und magnetisches Feld pro Photon interpretiert werden. \rightarrow



► 101 Verschiebung der Pole in der komplexen q -Ebene

Die Polstellen des Nenners liegen bei $q = \frac{k-i\epsilon}{2}$. Integrieren wir den Winkelanteil in (C.14) aus, indem wir den Richtungsvektor \mathcal{Y} in die sphärische z -Richtung legen, d.h. $\mathcal{Y} = r\mathbf{e}_z$, erhalten wir

$$G(\mathcal{Y}) = -\frac{1}{8\pi^3} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\infty} q^2 \sin(\vartheta) \frac{e^{i\mu r \cos(\vartheta)}}{q^2 - k^2 - i\epsilon} d\varphi d\vartheta dq$$

$$G(\mathcal{Y}) = -\frac{1}{4\pi^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\infty} q^2 \sin(\vartheta) \frac{e^{i\mu r \cos(\vartheta)}}{q^2 - k^2 - i\epsilon} d\vartheta dq$$

$$G(\mathcal{Y}) = -\frac{1}{4\pi^2 r} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{i\mu r}^{-i\mu r} \int_0^{\infty} q \frac{e^{iu}}{q^2 - k^2 - i\epsilon} du dq$$

$$G(\mathcal{Y}) = -\frac{1}{4i\pi^2 r} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} (e^{i\mu r} - e^{-i\mu r}) dq$$

Substitution von $q \rightarrow -q$ im hinteren Term führt auf

$$G(\mathcal{Y}) = -\frac{1}{4i\pi^2 r} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{i\mu r}}{q^2 - k^2 - i\epsilon} dq \quad (C.15)$$

Wir können nun den Residuensatz anwenden

$$\text{Res} = \frac{f(q)}{f'(q)} \Big|_{z_0} \quad (C.16)$$

Unser Ziel ist es nun $\psi_k(\mathbf{r})$ allgemein zu bestimmen, dazu betrachten wir erneut (C.3) und schreiben diese um in

$$(\Delta + k^2) \psi_k(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}). \quad (\text{C.6})$$

Diese Differentialgleichung ist eine Wellengleichung mit Inhomogenität. Die Lösung eines solchen Problems geschieht mit Hilfe der Greenschen Funktion, welche uns erlaubt die Wellenfunktion in einen homogenen Teil und einen inhomogenen Teil zu separieren.

$$\phi(x) = \phi_0(x) + \int G(x, x') f(x') dx' \quad (\text{C.7})$$

Dabei ist ϕ_0 die allgemeine homogene Lösung des Problems und $f(x)$ die Inhomogenität. Es bleibt noch die Greensche Funktion $G(x, x')$ zu bestimmen. In der Streutheorie bestimmen wir diese Funktion durch die Bedingung

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{C.8})$$

Durch Transformation in den Fourierraum ergibt sich die Bestimmungsgleichung

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \int d^3 y e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} G(\mathbf{y}). \quad (\text{C.9})$$

Wobei zur Vereinfachung die Substitution $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \mathbf{y}$ verwendet wurde. Einsetzen von (C.9) in (C.8) liefert

$$\Delta \left(\int d^3 y e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} G(\mathbf{y}) \right) + k^2 \int d^3 y e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} G(\mathbf{y}) = \int d^3 y e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} \delta(\mathbf{y}). \quad (\text{C.10})$$

Ausführen der Ableitung im ersten Term nach \mathbf{y} führt auf

$$(k^2 - q^2) \tilde{G}(\mathbf{q}) = 1 \quad (\text{C.11})$$

Die Rücktransformation aus (C.9) lautet

$$G(\mathbf{y}) = \int d^3 q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} \tilde{G}(\mathbf{q}). \quad (\text{C.12})$$

Das Ergebnis aus (C.11) umgeformt und in die Rücktransformation (C.12) eingesetzt ergibt

$$G(\mathbf{y}) = \int d^3 q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} \frac{1}{k^2 - q^2} \quad (\text{C.13})$$

Dieses Integral enthält Polstellen und existiert daher bei $q = \pm k$ nicht. Um dennoch einen analytischen Ausdruck zu erhalten verschieben wir den Nenner um ein infinitesimal kleines Wegelement ϵ in der imaginären Ebene. Wir erhalten dann komplexe Polstellen und können den Residuensatz anwenden. Je nachdem ob man die Pole nach oben oder unten verschiebt erhält man als Lösung die retardierte ($\epsilon > 0$), oder die avancierte ($\epsilon < 0$) Greensfunktion. Wir betrachten im folgenden nur den Fall der retardierten Greensfunktion. Das Integral besitzt dann die Form

$$G(\mathbf{y}) = - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^3 q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} \frac{1}{k^2 - q^2 - i\epsilon} \quad (\text{C.14})$$

Der Hamiltonoperator lässt sich dann schreiben als

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right).$$

Wobei die Anzahlzustände, bzw *Fockzustände* $|n\rangle$ als Anzahl der Photonen in einer Mode interpretiert werden können.

Theorem Der *Anzahloperator* ist wie folgt definiert:

$$\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (1.35) \quad \times$$

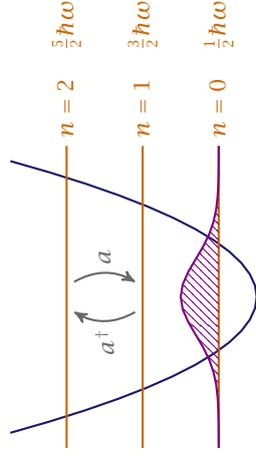
Mit Gleichung 1.35 vereinfacht sich der Hamiltonoperator zu

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right).$$

Für die Schrödingergleichung bedeutet dies

$$\hat{H} |n\rangle = E |n\rangle \quad \text{und} \quad n \in \mathbb{N} \\ \Rightarrow E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

D.h. dass das Problem auf den quantenmechanischen harmonischen Oszillator reduziert wurde, dessen Lösung wir bereit aus der Quantenmechanik kennen, bzw. in Abbildung 2 zu sehen ist.



► 2 Lösungen des harmonischen Oszillator

Theorem Für die Leiteroperatoren gilt

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \quad \times$$

1.2.1 Quantenfluktuationen

Berechnen wir zunächst den Erwartungswert von \hat{E}_x aus vorherigen Kapitel.

$$\begin{aligned} \langle \hat{E}_x \rangle &= \langle n | \hat{E}_x | n \rangle \\ &= E_0 \sin(kz) \left[\underbrace{\langle n | \hat{a}^\dagger | n \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n | \hat{a} | n \rangle}_{=0} \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Die Fluktuationen des elektrischen Feldes sind durch die *Varianz* gegeben. für diese gilt

$$\begin{aligned} \Delta \hat{E}_x &= \sqrt{\langle \hat{E}_x^2 \rangle - \underbrace{\langle \hat{E}_x \rangle^2}_{=0}} \\ &= \sqrt{E_0^2 \sin^2(kz) \left(\langle \hat{a}^\dagger \rangle^2 + \langle \hat{a} \rangle^2 + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} \right)} \\ &= \sqrt{E_0^2 \sin^2(kz) \langle \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle} \\ &= \sqrt{E_0^2 \sin^2(kz) \langle 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 \rangle} \\ &= \sqrt{2E_0^2 \sin^2(kz) \left\langle \hat{n} + \frac{1}{2} \right\rangle} \\ &= \sqrt{2} E_0 \sin(kz) \sqrt{\left\langle n + \frac{1}{2} \right\rangle} \end{aligned}$$

► *Beispiel* Wir betrachten eine Box mit 1 mm Kantenlänge mit Vakuum ($N = 0$), so gilt für die Grundmoden bei verschiedenen Wellenlängen

$$\begin{aligned} \lambda = 2 \text{ mm} &\Rightarrow E_0 \approx 0.15 \text{ V cm}^{-1} \\ \lambda = 500 \text{ nm} &\Rightarrow E_0 \approx 10 \text{ V cm}^{-1} \end{aligned}$$



1.2.2 Multimoden Felder und Zustandsdichte

Wir betrachten die verschiedenen Moden in einer Box, wie in Abbildung 3, für diese gilt

$$\begin{aligned} k_x &= \left(\frac{2\pi}{L} \right) m_x \\ k_y &= \left(\frac{2\pi}{L} \right) m_y \\ k_z &= \left(\frac{2\pi}{L} \right) m_z \end{aligned}$$

Für die Wellenzahl bedeutet dies

Quantenmechanische Streuung

Die Streutheorie wird vor allem genutzt um Aufschluss über den Aufbau von Materie, aber auch von Elementarteilchen, zu erhalten. Dabei haben wir ein Objekt vorliegen, welches durch ein einfallendes Wellenpaket beschrieben wird, der Streuer besitzt hingegen ein Streupotential $V(\mathbf{r})$, was auf das einfallende Wellenpaket wirkt. In einer unendlichen Entfernung zum Streuer lautet das einfallende Wellenpaket zum Zeitpunkt t_0

$$\psi_0(\mathbf{r}, t_0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}. \quad (\text{C.1})$$

Wir legen die Koeffizienten $a_{\mathbf{k}}$ so fest, dass die Welle mit der Gruppengeschwindigkeit $\mathbf{v} = \hbar \mathbf{k}_0 / m$ zum Streuer hinbewegt. Interessant ist die Wellenfunktion für spätere Zeiten, insbesondere nach der Wechselwirkung mit dem Streuer. Für ein freies Teilchen lässt sich die Stationäre-Schrödingergleichung exakt lösen, man erhält dabei die Eigenenergien

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (\text{C.2})$$

Nehmen wir an, dass $\psi_{\mathbf{k}}$ Eigenfunktionen des Hamilton-Operators mit Streupotential $V(\mathbf{r})$ sind, dann lautet unsere Eigenwertgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}. \quad (\text{C.3})$$

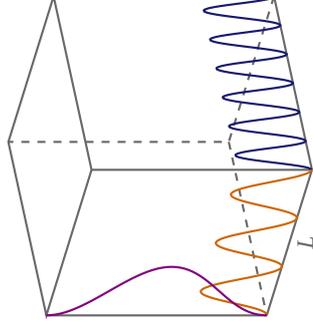
Statt (C.1) nach ebenen Wellen zu entwickeln, können wir $\psi_0(\mathbf{r}, t_0)$ auch nach Eigenfunktionen der Lösung von (C.3) entwickeln

$$\psi_0(\mathbf{r}, t_0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}. \quad (\text{C.4})$$

Dabei sind die Koeffizienten $A_{\mathbf{k}}$ noch unbestimmt und charakterisieren später das Störpotential. Aus der Schrödingergleichung erhalten wir die Zeitentwicklung unserer Wellenfunktion (C.4)

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{r}, t) &= H \psi(\mathbf{r}, t) \\ i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{r}, t) &= E_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{r}, t) \\ \psi(\mathbf{r}, t) &= e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar} \psi_0(\mathbf{r}, t_0) \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar}$$



- ▶ 3 Moden in einer Box mit Kantenlänge L

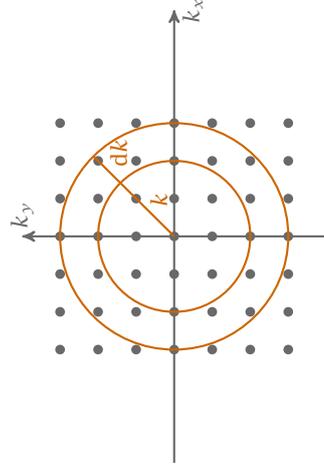
$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix}$$

Für die Anzahl der Moden im Intervall ergibt sich:

$$\begin{aligned} \Delta m &= \Delta m_x \cdot \Delta m_y \cdot \Delta m_z \\ &= 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \Delta k_x \cdot \Delta k_y \cdot \Delta k_z \end{aligned}$$

Der Faktor 2 rührt daher, dass 2 unabhängige Polarisierungen existieren.

Frage: Wie viele Moden liegen in der Schale $|\mathbf{k}| + dk$ bzw. $\omega + d\omega$ wobei $\omega = ck$? \rightarrow



- ▶ 4 Zweidimensionale Moden in einem infinitesimalen Kreissegment dk

Für die Beantwortung der Frage betrachten wir Abbildung 4 wobei wir annehmen, dass $\lambda \ll L$, so dass für das wir folgenden Differentialoperator erhalten

$$\begin{aligned} dm &= 2 \frac{V}{8\pi^3} dx dy dz \\ &= 2 \frac{V}{8\pi^3} k^2 dk \underbrace{\sin(\theta) d\theta d\phi}_{=4\pi} \\ &= \frac{2V}{8\pi^3} 4\pi k^2 dk \end{aligned}$$

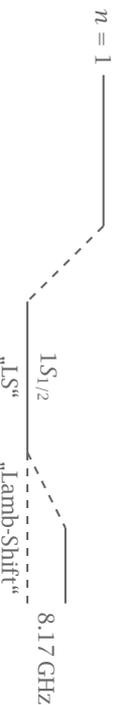
Damit ergibt sich die *Modendichte* zu

$$\varrho(k) dk = \frac{k^2}{\pi^2} dk \quad (1.36)$$

$$\varrho(k) dk = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega \quad (1.37)$$

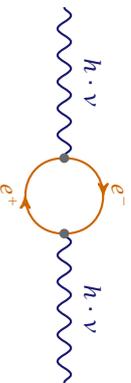
1.3 Lambshift

In Abbildung 5 ist die Lambaufspaltung des Wasserstoffatoms angedeutet, eine zusätzliche Verschiebung der Energieniveaus. Ursachen des *Lambshifts*:



► 5 Lambaufspaltung des $1S_{1/2}$ Zustands des Wasserstoffatoms

1.) Aus der spontanen Paarbildung von Elektronen und Positronen folgt die Quantisierung des Vakuums. Vgl. Abbildung 6.



► 6 Spontane Paarbildung im Feynmandiagramm

2.) Vakuumfluktuationen des elektrischen Feldes induzieren eine Oszillation des Elektrons (keine Zitterbewegung!). Vgl. Abbildung 7.

wobei T eine fiktive Temperatur darstellen soll. Wir sehen also, dass die Atome durch die spontane Emission erhitzt werden, d.h. dass E zunimmt, was einer thermischen Bewegung entspricht. Da jedoch kein thermodynamisches Gleichgewicht vorliegt, ist T nur fiktiv, d.h. T ist für ein isoliertes Atom wohl definiert. Die Viskosität dagegen neigt dazu die Atome zu bremsen, also sie zu kühlen. Sind beide Effekte im Gleichgewicht erhalten wir eine Gleichgewichtstemperatur, eine fiktive Temperatur der Atome im stationäre Fall. Diese Temperatur bietet einen Weg die durchschnittliche Geschwindigkeit zu messen. Nach der Definition der Viskosität erhalten wir für die zeitliche Änderung der Energie

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{\text{vis}} = \frac{1}{2} M \frac{d}{dt} v^2 = -M \gamma v^2 = -\frac{\gamma p^2}{M}.$$

Mit dem Effekt der spontanen Emission finden wir

$$\frac{dE}{dt} = \frac{2n_0 \hbar^2 k^2}{M} - \frac{\gamma p^2}{M}.$$

Im stationären Fall gilt $dE/dt = 0$ und wir erhalten den Gleichgewichtswert

$$p_{eq}^2 = \frac{2n_0 \hbar^2 k^2}{\gamma_{\max}} = \frac{1}{2} \hbar \Gamma M,$$

wobei wir $\gamma = \gamma_{\max}$ gewählt haben. Damit erhalten wir die Temperatur

$$k_B T_D = \frac{p_{eq}^2}{M} = \frac{1}{2} \hbar \Gamma \quad (B.5)$$

Die Temperatur T_D wir auch als *Dopplertemperatur* bezeichnet. Eine analoge Schreibweise des stationären Falls ist

$$D = \gamma p_{eq}^2 = M \gamma k_B T.$$

Diese Relation ist auch als *Einstein-Relation* bekannt und verbindet dem Diffusionskoeffizienten mit der Viskosität. Es zeigt sich also, dass der Ursprung des dissipativen Prozesses die spontanen Emission ist, die mit der nicht einheitlichen Evolution korrespondiert.

Die Varianz ist folglich:

$$\Delta p^2(\delta t) = \langle p^2(\delta t) - \langle p(\delta t) \rangle^2 \rangle. \tag{B.4}$$

Da die spontanen und absorbierten Photonen nicht korreliert sind und $\langle \hbar Y \rangle = 0$ können die beiden Beiträge separat betrachtet werden:

1.) Der Beitrag der Varianz der absorbierten Photonen ist

$$\Delta p^2(\delta t) |_{\text{abs}} = \hbar^2 k^2 \langle (N_+ - N_-)^2 - (N_+ - N_-) \rangle = 2\hbar^2 k^2 n_0 \delta t$$

wobei aus der klassischen Eigenschaft der Poissonverteilung $\Delta N_{\pm}^2 = \langle N_{\pm} \rangle$ sowie der Tatsache, dass die + und - Zyklen unabhängig sind,

$$\langle N_+ N_- \rangle = \langle N_+ \rangle \langle N_- \rangle.$$

folgt.

2.) Der Beitrag der emittierten Photonen ist

$$\Delta p^2(\delta t) |_{\text{em}} = \hbar^2 \langle Y^2 \rangle = \hbar \sum_{i=1}^{N_+ + N_-} q_i^2 = \hbar^2 k^2 \langle N \rangle = 2n_0 \hbar^2 k^2 \delta t.$$

Da wir uns auf den eindimensionalen Fall beschränken gilt für die Photonenimpulse $\pm \hbar k$ eine Wahrscheinlichkeit von $1/2$. Somit finden wir für Gleichung B.4

$$\Delta p^2(\delta t) = 4n_0 \hbar^2 k^2 \delta t.$$

Diese Resultat stellt ein Random-Walk im eindimensionalen Impulsraum dar. In solch einem Random-Walk wird ein Schritt der Länge ℓ von rechts nach links mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$ geführt. Nach N Schritten gilt also für die durchschnittliche Distanz $\langle x \rangle = 0$. Die quadratische Distanz ist aber nicht null sondern

$$\langle x^2 \rangle = \Delta x^2 = N \ell^2.$$

Braucht jeder Schritt die Zeit τ , so ergibt sich nach einer Zeit $\delta t = N\tau$ die quadratische Abweichung

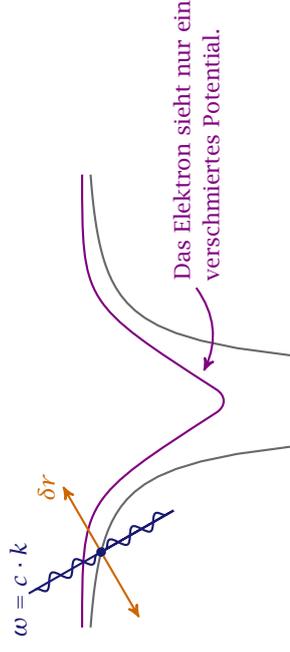
$$\Delta x^2 = \frac{\ell^2}{\tau} \delta t = 2D \delta t,$$

wobei D der Diffusionskoeffizient ist. Die kinetische Energie eines Atoms nimmt hierbei um

$$\frac{\Delta p^2(\delta t)}{2M}$$

zu. Daher neigt die Diffusion dazu die kinetische Energie zu steigern. Nimmt man Bezug auf die statistische Mechanik gilt

$$E = \frac{1}{2} k_B T,$$



► 7 Veranschaulichung der Vakuumfluktuationen

Abschätzung der Energieverschiebung $\langle \delta V \rangle$ durch Oszillationen nach Welton (Phys. Rev. 74, 1157 (1948)). Wir unterziehen V einer Taylorentwicklung

$$\delta V = \sum_i \frac{\partial V}{\partial x_i} \delta x_i + \sum_{i,k} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_i \delta x_k.$$

Da die Fluktuationen isotrop sind, verschwindet das zeitliche Mittel

$$\langle \delta x \rangle_t = 0$$

und unabhängig bezüglich der Richtung ist

$$\langle \delta x_i \delta x_k \rangle_t = 0 \quad \text{für } i \neq k.$$

Weiterhin gilt:

$$\langle \delta \mathbf{r}^2 \rangle_t = 3 \langle \delta x^2 \rangle.$$

Für $\langle \delta V \rangle$ bedeutet dies

$$\langle \delta V \rangle = \frac{1}{6} \langle \Delta V(\mathbf{r}) \rangle \langle \delta r^2 \rangle.$$

Wir betrachten nun $\langle \Delta V(\mathbf{r}) \rangle_t$

$$\begin{aligned} \langle \Delta V(\mathbf{r}) \rangle &= \left\langle n, \ell, m \left| \Delta \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right| n, \ell, m \right\rangle \\ &= \left(-\frac{e^2}{\epsilon_0} \right) \langle n, \ell, m | \delta(r) | n, \ell, m \rangle \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{\pi a_0^3} \frac{Z^4}{n^3} \quad \text{für } \ell = 0 \end{aligned}$$

Die Deltafunktion $\delta(r)$ zeigt, dass der größte Effekt am Ursprung auftritt. Es folgt für den zweiten Faktor

$$\langle \delta \mathbf{r}^2 \rangle = \sum_k \langle \delta \mathbf{r}_k^2 \rangle$$

wobei $\omega_k = c \cdot k$ ist. Wir bedienen uns folgendem Ansatz:

$$\begin{aligned} m \delta \mathbf{r}_k &= e \mathbf{E}_k e^{i\omega_k t} \\ \Rightarrow \delta \mathbf{r}_k &= -\frac{e}{m} \frac{\mathbf{E}_k}{\omega_k^2} e^{i\omega_k t} \end{aligned}$$

Somit ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \delta \mathbf{r}^2 \rangle &= \sum_k \frac{e^2}{\omega^4 m^2} \langle \mathbf{E}_k^2 \rangle \\ &= 2 \frac{V}{8\pi^3} \int \frac{e^2}{m^2 c^4 k^4} \langle \mathbf{E}_k^2 \rangle \underbrace{d^3k}_{k^2 dk \cdot 4\pi} \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{E}_k \rangle &= \langle E_0^2 \sin^2(kz) \rangle \\ &= \frac{hc}{V \epsilon_0} \frac{1}{2} \end{aligned}$$

ergibt sich

$$\langle \delta \mathbf{r}^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{\pi^2} \frac{e^2}{m^2 c^3} \frac{h}{\epsilon_0} \int_0^\infty \frac{1}{k} dk \quad (1.38)$$

Diese Integral divergiert aber bezüglich der Integrationsgrenzen, d.h. es muss sowohl für die obere als auch untere grenzen eine Grenze gefunden werden, so dass eine sinnvolle Lösung gefunden werden kann.

Untere Grenze: Die niedrigste Energie ist durch den Abstand zum nächsten Energieniveau gegeben.

$$\begin{aligned} E_{\text{Ryd}} &= \frac{m e^4 Z^2}{(4\pi \epsilon_0)^2 2\hbar^2} \\ k_{\text{min}} &= \frac{E_{\text{Ryd}} \eta}{\hbar c} \quad \text{mit} \quad \eta = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) \end{aligned}$$

Obere Grenze: Bewegung des Elektrons wird durch die relativistische Massenzunahme gehemmt ($\hbar \omega_{\text{max}} \approx mc^2$):

$$k_{\text{max}} = \frac{m c^2}{\hbar c} = \frac{m c}{\hbar}$$

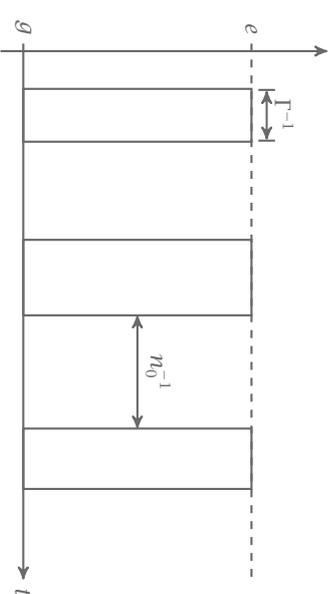
wobei $E_R = Mv_R^2/2$ die Rückstoßenergie ist, d.h. die kinetische Energie wenn ein Atom ein Photon de Impuls $\hbar k$ emittiert und genauso die Energie die ein Atom annimmt bei Absorption eines Photons mit Impuls $\hbar k$. v_R ist dementsprechend die Rückstoßgeschwindigkeit. Numerische Werte für γ ergeben eine Beziehung der Form

$$\gamma \approx 5 \cdot 10^{-3} n_0 = 2.5 \cdot 10^{-3} I S.$$

Mit $S \ll 1$ folgt

$$\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1} \ll \gamma^{-1}.$$

Unter diesen Umständen erhalten wir drei Zeitskalen im Problem, siehe dazu Abbildung 100. Die Relation $\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1}$ zeigt, dass die Fluoreszenzzyklen nicht überlappen und unabhängig



► 100 Eine Sequenz von Fluoreszenzzyklen

sind. Sei δt ein Zeitintervall mit $\Gamma^{-1} \ll \delta t \ll \gamma^{-1}$ und N_{\pm} die Anzahl der Zyklen $\pm k$ in diesem Intervall. Da $\delta t \ll \gamma^{-1}$ hat die Geschwindigkeit der Atome nicht die Zeit sich merklich unter der Viskosenkraft im Intervall δt zu ändern. Deshalb können wir über das Intervall mitteln

$$\langle N_{\pm} \rangle = n_{\pm}(v) \delta t.$$

Sei $p(N_+, N_-, \delta t)$ die Wahrscheinlichkeit N_+ ($+k$) Zyklen und N_- ($-k$) Zyklen im Intervall δt zu beobachten. Da die Fluoreszenzzyklen unabhängig sind, folgt die Wahrscheinlichkeit der Poissonverteilung (Wahrscheinlichkeitsverteilung)

$$p(N_+, N_-, \delta t) = \frac{\langle N_+ \rangle^{N_+} \langle N_- \rangle^{N_-} e^{-(\langle N_+ \rangle + \langle N_- \rangle)}}{N_+! N_-!}.$$

Wir verwenden $\hbar q, \dots, \hbar q_{N_+, N_-}$ um N_+ + N_- Impulse der spontan emittierten Photonen eines Atoms im Intervall δt zu bezeichnen. Dementsprechend bezeichnen wir mit $\hbar Y$

$$\hbar Y = \hbar q_1 + \dots + \hbar q_{N_+, N_-}.$$

Die emittierten Photonen sind nicht miteinander korreliert und $\langle Y \rangle = 0$. Die durchschnittliche Variation der Impulse während der Zeit δt is aufgrund der absorbierten Photonen

$$\langle p(\delta t) \rangle = (n_+(v) - n_-(v)) \hbar k \delta t.$$

Dopplereffekt Photonen der Frequenz $\omega - kv$ vom Laser \mathbf{k} und Photonen der Frequenz $\omega + kv$ vom Laser mit $-\mathbf{k}$ sehen. Aufgrund der negativen Verstimmung der beiden Laser sind die Photonen mit Wellenvektor \mathbf{k} näher an der Resonanzfrequenz und werden im höheren Maße absorbiert als jene mit $-\mathbf{k}$. Dies führt zu einer Kraft in $+z$ Richtung. Umgekehrt für Atome die nach rechts gehen eine Kraft in $-z$ Richtung. Zusammenfassend werden also Atome in $+z$ Richtung bevorzugt Photonen mit Wellenvektor \mathbf{k} absorbieren und Atome in $-z$ Richtung bevorzugt Photonen mit Wellenvektor $-\mathbf{k}$. In beiden Fällen werden die Atome abgebremst und eine Art viskose Kraft verspüren. Die durchschnittliche Kraft auf ein Atom mit der Geschwindigkeit v ist demnach

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \hbar \mathbf{k} [n_+(v) - n_-(v)],$$

mit

$$n_{\pm}(v) = \frac{\Gamma}{4} \frac{\omega_k^4}{(\delta \mp kv)^2 + \Gamma^2/4}. \tag{B.2}$$

Entwickeln von Gleichung (B.2) in Potenzen der Geschwindigkeit mit Ordnung v führt zu

$$n_{\pm}(v) = \frac{\Gamma \omega_k^4/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \left(1 \pm \frac{2\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \right).$$

Diese Gleichung gibt die durchschnittliche Anzahl von Fluoreszenzzyklen pro Sekunde $2n_0$

$$n_0 = \frac{1}{2} [n_+(v) + n_-(v)] = \frac{\Gamma \omega_k^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} = \frac{\Gamma}{2} S$$

und eine Kraft proportional zu

$$\begin{aligned} n_+(v) - n_-(v) &= n_0 \frac{4\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \\ \Rightarrow \langle \mathbf{F} \rangle &= \hbar \mathbf{k} [n_+(v) - n_-(v)] \\ &= n_0 v \frac{4\hbar \delta k^2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \mathbf{k}. \end{aligned} \tag{B.3}$$

Die Viskosität γ ist definiert als

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v}.$$

Für Gleichung B.3 bedeutet dies

$$\gamma = -\frac{\langle \mathbf{F} \rangle}{M \mathbf{v}} = -n_0 \frac{4\hbar^2 k^2}{M} \frac{\delta}{\delta^2 + \Gamma^2/4}.$$

γ ist positiv, da $\delta < 0$. Ist n_0 konstant, so ist die Viskosität maximal bei $\delta = -\Gamma/2$, d.h.

$$\gamma_{\max} = \frac{4\hbar^2 k^2}{M \Gamma} n_0 = \frac{8n_0 \hbar^2 k^2}{\hbar \Gamma^2 M} = \frac{8n_0}{\hbar \Gamma} E_R,$$

Somit folgt für Gleichung 1.38

$$\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{1}{k} dk = 2 \ln \left(\frac{c 4\pi \epsilon_0 \hbar}{e^2 Z} \sqrt{\frac{2}{\eta}} \right).$$

Für $\langle V \rangle$ bedeutet dies

$$\langle \delta V \rangle = \frac{1}{6} \frac{e^4 \hbar}{\epsilon_0^3 \pi^3 a_0^3 m^2 c^3} \frac{Z^4}{n^3} \ln \left(\frac{c 4\pi \epsilon_0 \hbar}{e^2 Z} \sqrt{\frac{2}{\eta}} \right).$$

Hierbei ist der Term Z^4/n^3 dominant da der Logarithmus mit $\sim \ln(n/Z)$ abfällt, bzw. ansteigt.

In Tabelle 1 sind verschiedene Zustände und deren exakte sowie mit der obigen Rechnung gefundenen Werte zu sehen.

Zustand	exakt [GHz]	Rechnung [GHz]
1S _{1/2}	8.17	11.7
2S _{1/2}	1.057	1.69
2P _{1/2}	-14	0
3S _{1/2}	0.313	0.544

► 1 Vergleich exakter und durch die Rechnung ermittelten Werte der Lambverschiebung für verschiedene Zustände des Wasserstoffatoms.

1.4 Hyperfeinstruktur und Zeemaneffekt im Wasserstoffatom

Hyperfeinstruktur

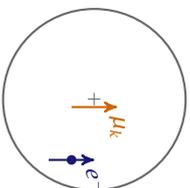
Der Atomkern hat im allgemeinen elektrische- und magnetische Multipole. Die Wechselwirkung von Kernspin und Elektronspin führt zur *Hyperfeinstruktur*, sie ist wesentlich kleiner als die Feinstruktur weshalb zu deren Messung im allgemeinen eine besonders hohe spektrale Auflösung erforderlich ist.

Fragen 1.) Wie kann man die Hyperfeinstrukturaufspaltung berechnen?

2.) Wie groß ist $\mu_K \cdot B_e(r=0)$?

Im Folgenden wird der s-Zustand des H-Atoms betrachtet, wobei der Atomkern ein magnetisches Moment μ_K besitzt, bzw. einen Kernspin und das Elektron einen Elektronenspin. Vgl. Abbildung 8. Für die Magnetisierung gilt

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = -g_e \mu_B \mathbf{S} \cdot |\psi_{100}(r)|^2 \tag{1.39}$$



► 8 Atomkern mit magnetischen Moment und Elektron mit Spin im Wasserstoffatom bezüglich eine s -Zustands

wobei der Term $S \cdot |\psi_{100}(r)|^2$ die *Spin-dichte* repräsentiert und $g_e \mu_B S \cdot |\psi_{100}(r)|^2$ die *magnetische Dipoldichte*. Zerlegen wir unser Problem in Kugeln mit konstanter Magnetisierung M_i , so gilt für die Gesamtmagnetisierung am Koordinatenursprung

$$M(0) = \sum_i M_i$$

Bemerkung: Aus der Elektrodynamik wissen wir, das eine Kugel mit konstanter Magnetisierung ein Magnetfeld am Ursprung erzeugt, für das

$$B(0) = \frac{2}{3} \mu_0 M \tag{1.40}$$

gilt (siehe J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, Bd. 3, Wiley New York etc., 1962). ◀

Unter Verwendung von Gleichung (1.40) gilt für das Magnetfeld am Kernort

$$\begin{aligned} B(0) &= \frac{2}{3} \mu_0 \sum_i M_i \\ &= \frac{2}{3} \mu_0 M_e(0) S \end{aligned}$$

und mit Gleichung (1.39)

$$\begin{aligned} B_e(0) &= -\frac{4}{3} \mu_0 \mu_B S \cdot \underbrace{|\psi_{100}(r)|^2}_{=\frac{1}{\pi a_0^3}} \\ &= -\frac{4\mu_0 \mu_B}{3\pi a_0^3} S \end{aligned} \tag{1.41}$$

Für den Wechselwirkungsterm im Hamiltonoperator folgt somit

$$\begin{aligned} H_{HF} &= -\mu_p B_e \\ &= \frac{4\mu_0}{3\pi a_0^3} g_p \mu_k \mu_B I \cdot S \end{aligned} \tag{1.43}$$

Die in der Gleichung aufkommenden Konstanten sind in Tabelle 2 mit ihren Definitionen aufgeführt. Im Fall des Wasserstoffatoms nimmt der g -Faktor g_p den Wert 5.58 an. Für

B

Theoretische Behandlung der Laserkühlung anhand der Dopplerkühlung

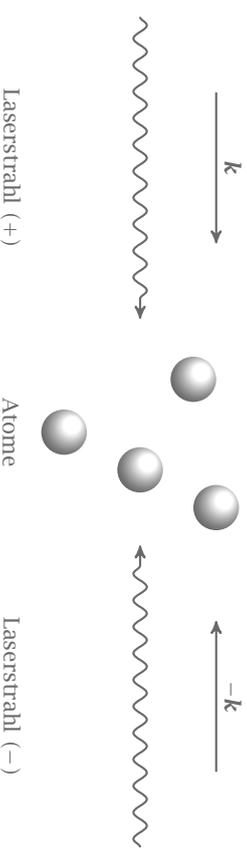
Eine wichtige Anwendung der spontanen Lichtkraft

$$F_{\text{spont}} = \hbar k_i \frac{\Gamma}{2S + 1} \tag{B.1}$$

ist die Laserkühlung (engl.: doppler cooling) von Atomen. Im Folgenden soll das Prinzip der *Dopplerkühlung* näher betrachtet werden. Die Atome sind hierbei in einem zwei-Niveau-System mit einem Energieunterschied von $\hbar\omega_0$. Sie sind zwischen zwei Laser gleicher Frequenz ω lokalisiert die von beiden Seiten eingestrahlt werden. Die Frequenz soll nahe der Resonanzfrequenz der Atome sein, bei einer Verstimmung von $\delta = \omega - \omega_0 < 0$. Um die Diskussion zu vereinfachen betrachten wir den eindimensionalen Fall (insgesamt zwei Laser in z -Richtung ausgerichtet). Die Laserstrahlen haben hierbei die Wellenvektoren

$$k \parallel z \quad \text{und} \quad -k \parallel -z.$$

Ein Atom im Feld beider Laser durchläuft Fluoreszenzzyklen. Ein Fluoreszenzzyklus besteht hierbei aus der Absorption eines Photons eines Lasers im Grundzustand. Das Atom geht somit in einen angeregten Zustand über. Spontane Emission führt zum Rückfall in den Grundzustand. Sei $n_+(v)$ die Anzahl der Fluoreszenzzyklen pro Sekunde die ein Atom mit



► 99 Das Prinzip der Laserkühlung

der Geschwindigkeit v mit der Absorption von Photonen mit Wellenvektor k durchläuft und $n_-(v)$ die Anzahl der Fluoreszenzzyklen mit Absorption von Photonen mit Wellenvektor $-k$. Bewegt sich ein Atom nach links, vergleiche hierzu Abbildung 99, wird es gemäß dem

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} [S_i, H_{\text{Dirac}}] &= \frac{\hbar}{2} c p_j \begin{pmatrix} 0 & 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \\ 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \\ &= i\hbar c \varepsilon_{ijk} p_j \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \\ &= i\hbar c \varepsilon_{ijk} p_j \alpha_k \\ &= i\hbar c (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\alpha}) \\ &= -i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_i, H_{\text{Dirac}}] &= \underbrace{[\varepsilon_{ijk} r_j p_k, c\alpha_\ell p_\ell]}_{=0} + m_0 c^2 \underbrace{[\varepsilon_{ijk} r_j p_k, \beta]}_{=0} \\ &= -c\varepsilon_{ijk} [\alpha_\ell p_\ell, r_j p_k] \\ &= -c\varepsilon_{ijk} ([\alpha_\ell p_\ell, r_j] p_k + r_j [\alpha_\ell p_\ell, p_k]) \\ &= -c\varepsilon_{ijk} \left\{ \underbrace{[\alpha_\ell [p_\ell, r_j]}_{=0} + [\alpha_\ell, r_j] p_\ell \right\} p_k + r_j \underbrace{[\alpha_\ell [p_\ell, p_k]}_{=0} + [\alpha_\ell, p_k] p_\ell \Big\} \\ &= -c \varepsilon_{ijk} \alpha_\ell p_k (-i\hbar \delta_{\ell j}) \\ &= i\hbar c \varepsilon_{i\ell k} \alpha_\ell p_k \\ &= i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \end{aligned}$$

Dies bedeutet für den Kommutator $[\mathbf{S} + \mathbf{L} = \mathbf{J}, H_{\text{Dirac}}]$:

$$\begin{aligned} [\mathbf{L} + \mathbf{S}, H_{\text{Dirac}}] &= [\mathbf{L}, H_{\text{Dirac}}] + [\mathbf{S}, H_{\text{Dirac}}] \\ &= i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}) - i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Konstante	Kennzeichnung	Definition
Bohrmagneton	μ_B	$\frac{e\hbar}{2m_e c}$
Kernmagneton	μ_K	$\frac{e\hbar}{2m_p c}$

► 2 Definitionen von Kern- und Bohr-magneton

Gleichung (1.43) bedeutet dies

$$H_{\text{HF}} = \frac{a}{\hbar^2} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \quad (1.44)$$

Mit $F = I + S$ können wir folgende Relation herleiten

$$\begin{aligned} F^2 - I^2 - S^2 &= (I + S)^2 - I^2 - S^2 \\ &= 2I \cdot S \end{aligned} \quad (1.45)$$

Gleichung (1.45) in Gleichung (1.44):

$$H_{\text{HF}} = \frac{a}{2\hbar^2} (F^2 - I^2 - S^2) \quad (1.46)$$

Für die Konstante a gilt:

$$a = 5.58 \cdot \frac{4\mu_0 \hbar^2}{4\pi a_0^3} \mu_K \mu_B \approx 1420 \text{ MHz} \cdot h.$$

Ausgedrückt durch die Quantenzahlen gilt für Gleichung (1.46) unter Berücksichtigung, dass sowohl Elektronenspin als auch Kernspin den Wert 1/2 haben:

$$\begin{aligned} H_F &= \frac{a}{2} [F(F+1) - I(I+1) - S(S+1)] \\ &= \frac{a}{2} \left[F(F+1) - \frac{3}{2} \right] \\ &= \begin{cases} \frac{a}{4}, & F = 1 \\ -\frac{3a}{4}, & F = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Bemerkung: Durch die Kopplung $\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ werden die Kern- und Elektronenzustände verschränkt, d.h. der unkorrelierte Produktzustand

$$|I, m_I\rangle |S, m_S\rangle = |I, m_I, S, m_S\rangle$$

ist keine Eigenbasis mehr unter der $\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ Kopplung (jedoch weiterhin eine Orthonormalbasis). Die neue Eigenbasis ist jetzt

$$|F, m_F, I, S\rangle = \sum_{m_I, m_S} |I, m_I, S, m_S\rangle \underbrace{\langle I, m_I, S, m_S | F, m_F, I, S \rangle}_{(*)}$$

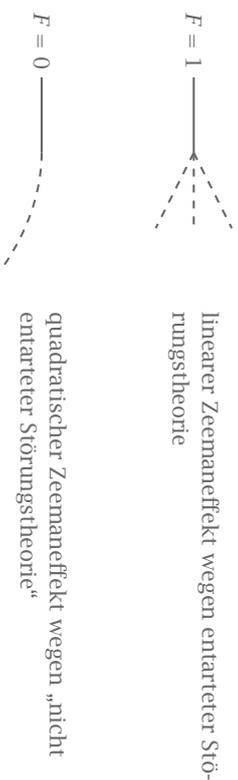
(*) sind die sogenannten *Clebsch-Gordon-Koeffizienten*. Es handelt sich dabei um Entwicklungskoeffizienten, mit denen man aus der Basis der Einzeldrehimpulse, bzw. Einzelspins in die Basis des Gesamtdrehimpulses, bzw. Gesamtspins übergeht. Die einzelnen Koeffizienten könne nach allen Regeln der Drehimpulsgymnastik bestimmt werden. \rightarrow

Zeemaneffekt

Durch anlegen eines schwachen Magnetfeldes erwarten wir eine Aufspaltung der Energieniveaus wie in Abbildung 9, den *Zeemaneffekt*. Schwach heißt hierbei, dass die Feinstruktur aufspaltung groß gegenüber dem Magnetfeld ist, d.h.

$$\Delta E_{HFS} > \mu_B B. \tag{1.47}$$

Die für $F = 1$ skizzierte Aufspaltung entspricht hierbei dem linearen Zeemaneffekt (aus der entarteten Störungstheorie) und die für $F = 0$ entspricht einem quadratischen Zeemaneffekt (aus der nicht entarteten Störungstheorie). Der Wechselwirkungsterm im Hamiltonian entspricht:



► 9 Lineare und quadratische Zeemanaufspaltung am Wasserstoffatom

$$\hat{H}_B = -\hat{\mu}_e \cdot \mathbf{B} = 2\mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_z. \tag{1.48}$$

Für die Basiszustände gilt:

$$|F = 1, m_F = 1\rangle = |+\rangle_s |+\rangle_l \tag{1.49}$$

$$|F = 1, m_F = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_s |-\rangle_l + |-\rangle_s |+\rangle_l) \tag{1.50}$$

$$|F = 1, m_F = -1\rangle = |-\rangle_s |-\rangle_l \tag{1.51}$$

$$|F = 0, m_F = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_s |-\rangle_l - |-\rangle_s |+\rangle_l) \tag{1.52}$$

Bemerkung: Der Zustand (1.49) ausgedrückt in der alten Basis ist:

$$|F = 1, m_F = 1\rangle \hat{=} \left| S = \frac{1}{2}, m_S = +\frac{1}{2}, L = \frac{1}{2}, m_L = \frac{1}{2} \right\rangle. \rightarrow$$

A

Beweise einiger nützlicher Kommutatorrelationen des Dirac-Hamiltonoperators

Der relativistische Hamiltonoperator nach Dirac lautet

$$H_D = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_0 c^2. \tag{A.1}$$

Mit den Beziehungen

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}. \tag{A.2}$$

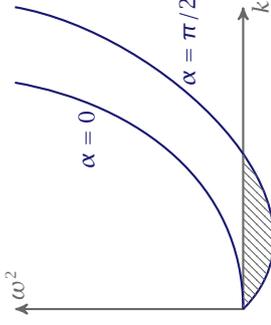
Wie wollen nun zeigen, dass im Falle des relativistischen Hamiltonoperators die Quantenzahlen l und s keine guten Quantenzahlen mehr sind, der Gesamtdrehimpuls j hingegen schon. Dazu muss gelten

$$\begin{aligned} [S, H_D] &\neq 0 \\ [L, H_D] &\neq 0 \\ [S + L, H_D] &= [J, H_D] = 0 \end{aligned} \tag{A.3}$$

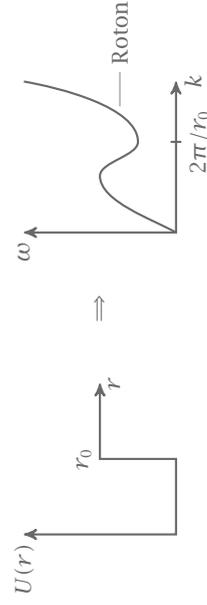
$$\begin{aligned} [S_i, H_{\text{Dirac}}] &= c [S_i, \alpha_j p_j] + m_0 c^2 \underbrace{[S_i, \beta]}_{=0} \\ &= c [S_i, \alpha_j] p_j + c \alpha_j \underbrace{[S_i, p_j]}_{=0} \end{aligned}$$

Betrachte:

$$\begin{aligned} [S_i, \alpha_j] &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_i, \sigma_j] \\ [\sigma_i, \sigma_j] & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$



► 97 Dispersionsrelation. Der schraffierte Bereich ist für die Instabilität verantwortlich.



► 98 Bogoliubov Dispersionsrelation.

Gleichung (1.49) und Gleichung (1.51) werden auch als gestreckte Zustände bezeichnet. Gleichung (1.50) ist ein symmetrischer Zustand, Gleichung (1.49) ein antisymmetrischer (analog für Rest).

Werden stärkere (vgl. (1.47)) Magnetfelder angelegt, betrachten wir

$$\hat{H}_{\text{ges}} = a\mathbf{I} \cdot \mathbf{S} + 2\mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_z \tag{1.53}$$

Die einzelnen Matrixelemente sind in Tabelle 3 zu sehen. Wir lösen also die Schrödingerglei-

F, m_F	1, 1	1, -1	1, 0	0, 0
1, 1	$\frac{a}{4} + \mu_0 B - E$			
1, -1		$\frac{a}{4} - \mu_0 B - E$		
1, 0			$\frac{a}{4} + E$	$\mu_B B$
0, 0			$\mu_B B$	$\frac{a}{4} + E$

► 3 Matrixelemente des Hamiltonian

chung:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \det(\hat{H} - E\mathbb{1}) \stackrel{!}{=} 0$$

Dies bedeutet

$$\det \begin{pmatrix} \frac{a}{4} + \mu_0 B - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a}{4} - \mu_0 B - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{a}{4} - E & \mu_B B \\ 0 & 0 & \mu_B B & \frac{a}{4} - E \end{pmatrix} = 0$$

Mit Hilfe der Blockstruktur können die Eigenwerte bestimmt werden, diese sind

$$E_{1/2} = \frac{a}{4} \pm \mu_B B \tag{1.54}$$

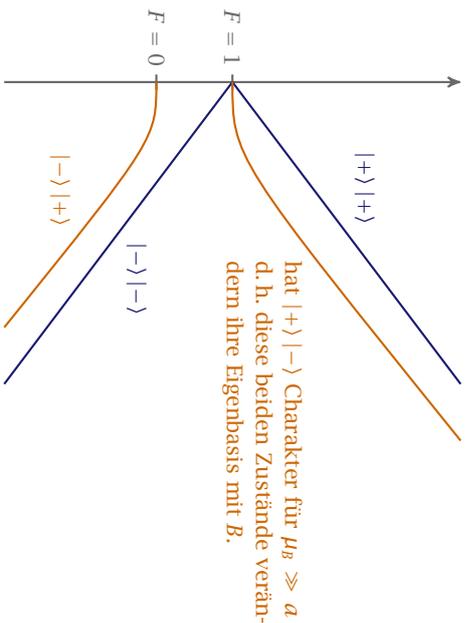
$$E_{3/4} = -\frac{a}{4} \pm \frac{a}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{2\mu_B B}{a}\right)^2} \tag{1.55}$$

Gleichung (1.54) sind hierbei die Eigenwerte zu den gestreckten Zuständen (linearer Zeeman-effekt), und Gleichung (1.55) sind die Eigenwerte des quadratischen Zeeman-effekt, allerdings bei kleinen Feldern (für große Felder wieder linear). Abbildung 10 veranschaulicht die Aufspaltung.

Vorsicht! Wir haben vernachlässigt, dass $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_e + \boldsymbol{\mu}_K$ ist. Korrekt wäre:

$$\hat{H}_B = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = g_e \mu_B B S_z - g_p \mu_K B I_z$$

d.h. für $g_p \mu_K B I_z \approx a/2$ ist eine Kreuzung zu beobachten ($B = 16.7\text{T}$).



► 10 Lineare und quadratische Zeemanaufspaltung im Wasserstoffatom

1.5 Übergänge und Auswahlregeln

Wir betrachten induzierte Übergänge zwischen stationären Zuständen. Die dominierende Wechselwirkung ist die *Dipolwechselwirkung*, für diese gilt:

$$\hat{H}_{WW} = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E},$$

wobei

$$\mathbf{E} = |E_0| \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} \boldsymbol{\mathcal{E}}).$$

Polarisationsvektor:

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\uparrow} = \boldsymbol{\mathcal{E}}_z$$

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\pm} = \frac{\boldsymbol{\mathcal{E}}_x \pm i\boldsymbol{\mathcal{E}}_y}{\sqrt{2}}.$$

Für die Übergangsrate gilt:

$$\text{Übergangsrate} \propto |E_0|^2 \left| \int \psi_f^* (\hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}) \psi_i dV \right|^2$$

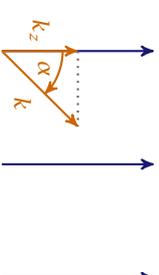
wobei $\hat{\mathbf{d}} = e \cdot \mathbf{r}$. Somit

$$\text{Übergangsrate} \propto |eE_0|^2 |\langle f | \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} | i \rangle|^2.$$

Mit Hilfe von Gleichung 4.45 führt eine Fouriertransformation zu

$$\begin{aligned} \frac{4\pi}{C_{dd}} \hat{u}_{dd}(k) &= k_z^2 \cdot \underbrace{\mathcal{F}\left(\frac{1}{r}\right)}_{4\pi/k^2} - \frac{4\pi}{3} \\ \implies \hat{u}_{dd} &= C_{dd} \left[\frac{k_z^2}{k^2} - \frac{1}{3} \right] \\ &= C_{dd} \left[\cos^2 \alpha - \frac{1}{3} \right]. \end{aligned}$$

Die Bedeutung des Winkels α ist in Abbildung 96 zu sehen.



► 96 Zur Veranschaulichung der Fouriertransformation und des Winkels α . Es zeigt sich $k_z = k \cos \alpha$.

Im Zusammenhang mit Bogoliubov gilt

$$g n(r, t) \rightarrow g n(r', t) + \int n(r', t) u_{dd}(r - r') \hat{\mathbf{d}}^3 r'.$$

D.h. wir erhalten

$$\omega^2 = k^2 \left[\frac{n_0}{m} (g + C_{dd} (\cos^2 \alpha - 1/3)) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^2} \right] \quad (4.46)$$

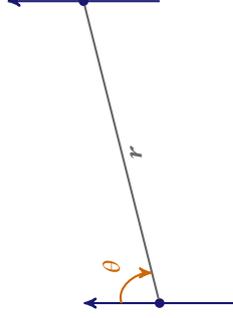
Es zeigt sich, falls $C_{dd} > 3g$ und $k \rightarrow 0$ wird $\omega^2 < 0$, d.h. es tritt eine Instabilität auf (Phononen induzierter Kollaps). Siehe hierzu die Dispersionsrelation in Abbildung 97.

Bemerkung: Allgemein geht die Fouriertransformation einer 2-Teilchen Wechselwirkung in die Bogoliubov Dispersionsrelation über (siehe Abbildung 98).

Damit erhalten wir ebenfalls das *Bogoliubov-Spektrum*

$$\omega^2 = k^2 \frac{g n_0}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{4 m^2} \quad (4.43)$$

Jetzt wollen wir zusätzlich noch die dipolare Wechselwirkung, wie sie bspw. in Abbildung 95 zu sehen ist berücksichtigen. Der Wechselwirkungsterm



► 95 Zur Veranschaulichung der dipolaren Wechselwirkung. Zwei Dipole deren Abstand durch r und dem Winkel θ beschrieben sind.

$$U_{dd} = \frac{1 - 3 \cos^2(\theta)}{r^3} \cdot \frac{C_{dd}}{4\pi}$$

enthält den anisotropen Anteil $3 \cos^2(\theta)$ und langreichweitige Wechselwirkung $1/r^3$. Je nach vorliegenden System nimmt hierbei C_{dd} unterschiedliche Werte an

$$C_{dd} = \begin{cases} \frac{d^2}{\epsilon_0}, \text{ el. dipolare Gase} \\ \mu_0 \mu^2, \text{ magn. dipolare Gase} \end{cases}$$

D.h. die nichtlineare Schrödingergleichung (GP-Gleichung) wird um einen nichtlokalen Term ergänzt

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \left[V_{ext} + \underbrace{g |\psi|^2}_{(a)} + \underbrace{\int |\psi(r', t)|^2 u_{dd}(r - r') d^3 r'}_{(b)} \right] \psi. \quad (4.44)$$

Term (a) beschreibt hierbei die Kontaktwechselwirkung mit $g = 4\pi \hbar^2 a/m$ und Term (b) die dipolare Wechselwirkung.

Betrachten wir nun Bogoliubov mit dipolarer Wechselwirkung. Hierzu zunächst einen Identität aus der Elektrodynamik

$$\frac{1 - 4 \frac{z^2}{r^2}}{r^3} = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} \frac{1}{r} - \frac{4\pi}{3} \delta(r). \quad (4.45)$$

Der Term $|\langle f | \hat{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | i \rangle|^2$ entspricht dem *Dipolmatrixelement*. Diese kann durch explizites Ausrechnen bestimmt werden.

$$\langle f | \hat{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | i \rangle = \int_0^\infty R_{n_f, \ell_f}(r) r^3 R_{n_i, \ell_i}(r) dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell_f, m_f}^* \frac{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon}}{r} Y_{\ell_i, m_i} \sin \theta d\theta d\phi$$

Im Allgemeinen ist der Radialteil ungleich Null, verschwindet also nicht. Die *Auswahlregeln* kommen aus dem Winkelanteil. Betrachte dazu zunächst

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{r}}{r} &= \frac{1}{r} (x\boldsymbol{\epsilon}_x + y\boldsymbol{\epsilon}_y + z\boldsymbol{\epsilon}_z) \\ &= \sin \theta \cos \phi \boldsymbol{\epsilon}_x + \sin \theta \sin \phi \boldsymbol{\epsilon}_y + \cos \theta \boldsymbol{\epsilon}_z \\ &\propto Y_{1,-1} \underbrace{\frac{\boldsymbol{\epsilon}_x + i\boldsymbol{\epsilon}_y}{\sqrt{3}}}_{\boldsymbol{\epsilon}_+^*} + Y_{1,0} \boldsymbol{\epsilon}_z + Y_{1,1} \underbrace{\frac{-\boldsymbol{\epsilon}_x + i\boldsymbol{\epsilon}_y}{\sqrt{2}}}_{\boldsymbol{\epsilon}_+^*} \end{aligned} \quad (1.56)$$

$\boldsymbol{\epsilon}$ kann wie folgt umgeschrieben werden

$$\boldsymbol{\epsilon} = A_{\sigma_-} \boldsymbol{\epsilon}_- + A_{\pi} \boldsymbol{\epsilon}_z + A_{\sigma_+} (-\boldsymbol{\epsilon}_+) \quad (1.57)$$

Merke

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ \boldsymbol{\epsilon}_+^* = 1 \quad \times \quad (1.58)$$

Somit folgt für den Term $\frac{r \cdot \boldsymbol{\epsilon}}{r}$ (bzw. Gleichung (1.56) mal (1.57)):

$$\frac{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon}}{r} \propto A_{\sigma_-} Y_{1,-1} + A_{\pi} Y_{1,0} + A_{\sigma_+} Y_{1,-1},$$

wobei

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

ist.

► **Beispiel** Wir betrachten die π -Übergänge.

$$I^\pi = \int Y_i^* \cos \theta Y_f \sin \theta d\theta d\phi$$

Unter Verwendung der Rotationssymmetrie um s, bzw. Rotation um den Winkel ϕ_0 ergibt sich:

$$I^\pi = e^{i(m_i - m_f)\phi_0} I^\pi$$

Diese Gleichung ist somit nur dann erfüllt, bzw. verschwindet, wenn $m_f = m_i$ oder

$$\Delta m = 0 \quad (1.59)$$

Für die σ_\pm -Übergänge folgt analog

$$\Delta m = \pm 1, \quad \blacktriangleleft \quad (1.60)$$

wobei $\Delta m = m_f - m_i$ zu beachten ist.

Weitere Auswahlregeln

Weitere Auswahlregeln folgen aus dem Winkelanteil, dazu betrachte

$$\int Y_f^* Y_{lm} Y_l d\Omega \tag{1.61}$$

Durch Verwendung der Eigenschaften von Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{lm} Y_{\theta m} = AY_{l+1,m+m_1} + BY_{l-1,m_1-m}$$

wobei A und B sind bekannte, jedoch uninteressante Konstanten. Weiter gilt die **Orthogonalitätsrelation** der Kugelflächenfunktionen:

$$\int Y_f^* Y_{l,m} d\Omega = \delta_{fl} \delta_{mm'}. \tag{1.62}$$

Für Gleichung (1.61) bedeutet dies

$$\int Y_f^* Y_{lm} Y_l d\Omega = A\delta_{f,l+1} \delta_{m_f,m_l+m} + B\delta_{f,l-1} \delta_{m_f,m_l-m}$$

Diese Gleichung ist erfüllt für

$$\Delta l = \pm 1 \tag{1.63}$$

In obiger Gleichung spiegelt sich die Drehimpulserhaltung im Lichtfeld wieder.

Bemerkung: Die hergeleiteten Dipolauswahlregeln geben nicht nur Auskunft darüber, ob ein Übergang erlaubt oder verboten ist, sondern auch welche Art von Polarisation das Licht aufweist. So liegt beim π -Übergang linear polarisiertes Licht vor, bei einem σ_{\pm} -Übergang rechts oder links zirkularpolarisiertes Licht.

Definition Zunächst definieren wir den **Paritätsoperator** \hat{P} , welcher eine Spiegelung des Zustandes an der Null verursacht. Folgende Transformationen werden durch ihn veranlasst

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &\rightarrow -\mathbf{r} \\ \theta &\rightarrow \theta - \pi \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi \end{aligned}$$

θ wird reflektiert und ϕ rotiert (vgl. Abbildung 11). ×

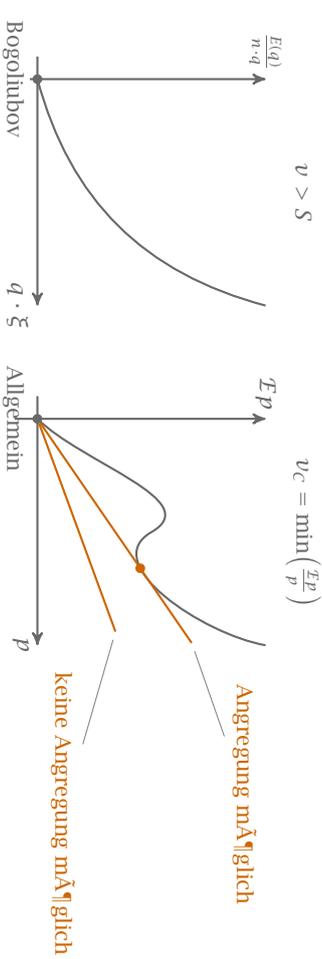
Es zeigt sich, dass die elektromagnetische Wechselwirkung invariant unter \hat{P} ist, d.h.

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0.$$

Die Eigenwerte des Paritätsoperators ergeben sich zu ± 1 , da

$$\hat{P}^2 = \mathbb{1}$$

d.h. \hat{P} entspricht einer Involution.



► 94 Zur Veranschaulichung des Landaukriteriums. Abgebildet ist einmal $E_l(nq)$ über q^2 und E_p über p . Unterhalb der roten Linie sind keine Anregungen möglich, oberhalb schon. Für die kritische Geschwindigkeit gilt $v_c = \min(E_p/p)$.

Jetzt linearisieren wir um eine homogene Dichte n_0

$$n(\mathbf{r}, t) = n_0 + \delta n(\mathbf{r}, t) \quad \text{und} \quad \delta n \ll n_0. \tag{4.37}$$

Damit in Gleichung (4.35) und (4.36) und behalte nur lineare Terme in δn , \mathbf{v} führt zu

$$\partial_t \delta n + n_0 \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{4.38}$$

$$m \partial_t \mathbf{v} + \nabla \left(g \delta n - \frac{\hbar^2}{4m n_0} \Delta \delta n \right) = 0. \tag{4.39}$$

Lösungsansatz mittels ebener Wellen

$$\begin{aligned} \delta n &= \delta n_1 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \\ \mathbf{v} &= \mathbf{v}_1 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}. \end{aligned}$$

Eingesetzt in Gleichung (4.39)

$$-i\omega \delta n_1 + n_0 i \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 = 0, \tag{4.40}$$

$$-m i \omega \mathbf{v}_1 + i \mathbf{k} \left\{ g \delta n_1 + \frac{\hbar^2 k^2}{4m n_0} \Delta \delta n_1 \right\} = 0. \tag{4.41}$$

Bemerkung: $\mathbf{v}_1 \parallel \mathbf{k}$ longitudinale Dichtewellen (Flüssigkeit). →

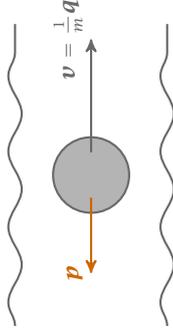
Ineinander einsetzen ergibt

$$\mathbf{v}_1 = i \mathbf{k} \left(g + \frac{\hbar^2 k^2}{4m n_0} \right) \frac{\delta n_1}{m i \omega}. \tag{4.42}$$

Einsetzen in Gleichung (4.40) ergibt

$$0 = i \omega \delta n_1 + n_0 i \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} \left(g + \frac{\hbar^2 k^2}{4m n_0} \right) \frac{\delta n_1}{m i \omega} \quad | \cdot i \omega$$

$$\omega^2 = \frac{n_0 k^2}{m} \left(g + \frac{\hbar^2 k^2}{4m n_0} \right).$$



► 93 Makroskopische Objekt in einer Flüssigkeit. Rot dargestellt ein emittiertes Teilchen mit Impuls $-p$.

mit \mathcal{E}_p für ein freies Teilchen. Im Ruhesystem des bewegten Objekts (makroskopisch) gilt

$$E(v) = E_0 + \frac{1}{2} M v^2, \tag{4.32}$$

wobei E_0 die Grundzustandsenergie im Ruhesystem der Flüssigkeit ist.

Betrachten wir einen Zustand mit einer Anregung zum Impuls \mathbf{p} und der Energie der Anregung $E_{ex} = E_0 + \mathcal{E}_p$, so erhalten wir (mit Gallileitrafo.)

$$E_{ex}(v) = E_0 + \mathcal{E}_p - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} M v^2.$$

Der Term $\mathcal{E}_p - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ entspricht hierbei der benötigten Anregungsenergie. Im Bezugssystem des Objekts ist sein Potential statisch, d.h. es kann keine Energie übertragen werden (Energieerhaltung)

$$\boxed{\mathcal{E}_p - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} = 0} \tag{4.33}$$

Damit Anregungen möglich sind, muss die Ungleichung, auch als **Landaukriterium** bekannt

$$v \geq \frac{\mathcal{E}_p}{q} = v_{ph} \tag{4.34}$$

erfüllt sein. Hierbei entspricht v_{ph} der Phasengeschwindigkeit. Nur für Geschwindigkeiten größer als die Phasengeschwindigkeit sind somit Anregungen möglich. Vergleiche hierzu Abbildung 93. D.h. die Superfluidität gilt nur bis zu einer bestimmten kritischen Geschwindigkeit (endlich und ungleich Null).

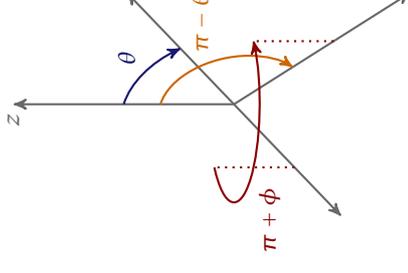
Alternative Herleitung des Bogoliubov-Spektrum

Die Kontinuitätsgleichung ist durch

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n \cdot \mathbf{v}) = 0 \tag{4.35}$$

gegeben. Die Eulergleichung ist

$$m \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \left(\frac{m v^2}{2} + g n + V_{ext} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) = 0. \tag{4.36}$$



► 11 Spiegelung eines Zustandes am Ursprung durch den Paritätsoperators \hat{P}

Die Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen zu \hat{P} , denn

$$\hat{P} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^l Y_{\ell m}.$$

Im folgenden wollen wir die Wirkung des Paritätsoperators auf den Winkelanteil des Dipolmatrixelements untersuchen, also

$$\hat{P} \int Y_f^* Y_{lm} Y_i d\Omega = (-1)^{\ell_i + \ell_f + 1} \int Y_f^* Y_{lm} Y_i d\Omega,$$

d.h. $\Delta \ell$ muss ungerade sein (insbesondere $\Delta \ell \neq 0$).

Bemerkung: 1.) Die Parität muss beim Dipolübergang verschieden sein, d.h. Anfangs- und Endzustand haben unterschiedliche Parität, da das Dipol-Matrixelement antisymmetrisch ist.

2.) Das Dipolmoment kann nicht größer sein als der Überlapp beider Wellenfunktionen. Für Experimente bedeutet dies, dass ein stärkerer Laser und damit verbunden mehr Geld benötigt wird.

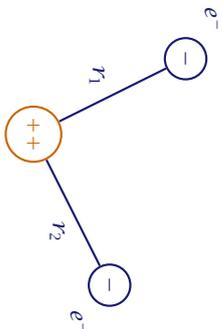
1.6 Das Heliumatom

Das **Heliumatom** entspricht einem schwereren Problem als dem des Wasserstoffatom, da es ähnlich dem Drei-Körper-Problem in der klassischen Mechanik nicht exakt lösbar ist. Abbildung 12 veranschaulicht das Problem.

Der Hamiltonoperator ist durch

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{12}$$

gegeben, wobei \hat{H}_{12} der Coulombwechselwirkung der beiden Elektronen entspricht. Im folgenden soll eine Lösung mittels geeigneter Näherungen gefunden werden. Folgende grobe Näherungen werden hier beachtet:



► 1.2 Prinzipielle Struktur des Heliumatoms

1.) Vernachlässigung aller relativistischen Effekte:

- $\ell_1 \cdot s_1, \ell_2 \cdot s_2$ – Spin-Bahn Wechselwirkung
- $\ell_1 \cdot s_2, \ell_2 \cdot s_1$ – Spin-other-orbit Wechselwirkung
- $s_1 \cdot s_2$ – Spin-Spin Wechselwirkung
- $\ell_1 \cdot \ell_2$ – Bahn-Bahn Wechselwirkung

2.) Vernachlässigung von $H_{1,2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1,2}}$ (Coulomb-Term)

Ein geeigneter Lösungsansatz ist

$$\begin{aligned} \psi_0 &= u_{n\ell m}(r_1) \cdot u_{n'\ell'm'}(r_2) \\ &= u_a(1) \cdot u_b(2) \\ &= u(ab) \end{aligned}$$

Hierbei sind $u_{n\ell m}$ und $u_{n'\ell'm'}$ die Wasserstoffwellenfunktionen. Für die Energien ergibt sich

$$E = E_n + E_{n'}$$

Wenn die Wellenfunktionen überlappen, kann Elektron 1 und Elektron 2 nicht unterschieden werden, d.h. es existiert eine entartete gleichberechtigte Lösung

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_0 &= u_a(2) \cdot u_b(1) \\ &= u_{ba}, \end{aligned}$$

also der Wechsel der Indizes von u_{ab} . Die allgemeine Lösung setzt sich aus beiden Lösungen zusammen

$$u = \alpha u_{ab} + \beta u_{ba}$$

$\hat{H}_{1,2}$ hebt die Entartung auf, da $H_{1,2}$ invariant unter \hat{P} ist,

$$\hat{P}H_{1,2} = +H_{1,2},$$

Setzen wir $E_q^0 = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$ und schreiben die Gleichungen in Matrixgleichungen um, so gilt

$$\det \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = 0 \tag{4.26}$$

$$\Rightarrow 0 = (E_q^0 + n g + \hbar \omega) (E_q^0 + n g - \hbar \omega) - n^2 g^2 \tag{4.27}$$

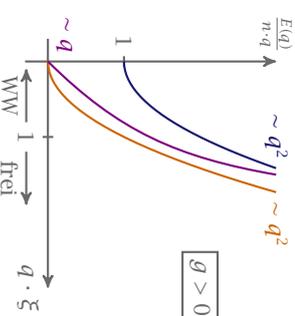
$$\Rightarrow (\hbar \omega)^2 = (E_q^0 + n g)^2 - (n g)^2 \tag{4.28}$$

$$= E_q^0 (E_q^0 + 2n g). \tag{4.29}$$

Hieraus folgt die **Bogoliubov-Dispersionsrelation**

$$E(q) = \hbar \omega = \sqrt{(E_q^0 + n g)^2 - (n g)^2} \tag{4.30}$$

Diese ist in Abbildung 92 aufgetragen. Es zeigt sich:



► 9.2 Bogoliubov-Dispersionsrelation. Dimensionslos mit charakteristischer Wechselwirkung nq und Healing Länge ξ .

► Für $q \rightarrow \infty$: $E(q) \approx E_q^0 + n g$.

► Für $q \rightarrow 0$: $E(q) \approx S \hbar q$, wobei S als Schallgeschwindigkeit der Form $S = \sqrt{n g / m}$ betrachtet werden kann.

Es liegt somit lineare Dispersion vor!

Bemerkung: Ist $g < 0$, also attraktive Wechselwirkung, dann kann $E(q)$ imaginär werden, d.h. es liegt Instabilität vor.

4.2.2 Landauerkriterium

Wir betrachten ein makroskopischen Objekt in einer Flüssigkeit (vgl. Abbildung 93). Für die Bilanzgleichung nach Emission eines freien Teilchens gilt

$$\frac{(q-p)^2}{2m} = \frac{q^2}{2m} - \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}}{2m} + \frac{p^2}{2m} \tag{4.31}$$

Setzen wir Gleichung (4.15) in (4.14) ein, wobei wir die Terme höherer Ordnung vernachlässigen, d.h.

$$|\psi|^2 = \psi^2 + \psi\delta\psi^* + \psi^*\delta\psi + \underbrace{|\psi|^2}_{\approx 0} \tag{4.16}$$

Der Ansatz lautet somit $\psi' = \psi + \delta\psi$ und führt zu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\delta\psi + V(r)\delta\psi + g(2|\psi|^2\delta\psi + \psi^2\delta\psi^*) = i\hbar\partial_t\delta\psi \tag{4.17}$$

Analog erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\delta\psi^* + V(r)\delta\psi^* + g(2|\psi|^2\delta\psi^* + (\psi^*)^2\delta\psi) = i\hbar\partial_t\delta\psi^* \tag{4.18}$$

Als Lösungsansatz der beiden gekoppelten Differentialgleichungen bietet sich

$$\delta\psi(r, t) = e^{-i\mu t/\hbar} [\mu(r)e^{-i\omega t} - v^*(r)e^{i\omega t}] \tag{4.19}$$

an. Einsetzen liefert

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + 2n(r)g - \mu - \hbar\omega \right] u(r) - n(r)g v(r) = 0 \tag{4.20}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + 2n(r)g - \mu + \hbar\omega \right] v(r) - n(r)g u(r) = 0 \tag{4.21}$$

Diese werden auch als **Bogoliubov Gleichungen** bezeichnet. Hierbei ist

$$\psi = \sqrt{n(r)}e^{-i\mu t/\hbar}.$$

Sei nun $V(r) = 0$, d.h. ein uniformes Gas mit konstanter Dichte n im Grundzustand. Es zeigt sich, dass aus der Translationsinvarianz, Lösungen der Form ebener Wellen resultieren

$$u(r) = u_q e^{iqr} \frac{1}{\sqrt{V}} \tag{4.22}$$

$$v(r) = v_q e^{iqr} \frac{1}{\sqrt{V}}, \tag{4.23}$$

wobei $1/\sqrt{V}$ lediglich ein Normierungsfaktor ist.

Mit $\mu = n(r)g$ folgt

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + ng - \hbar\omega \right) u_q - ng v_q = 0, \tag{4.24}$$

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + ng + \hbar\omega \right) v_q - ng u_q = 0. \tag{4.25}$$

d.h. es werden Zustände gleicher Parität gekoppelt. Der Hamiltonoperator \hat{H}_{12} ergibt sich somit zu

$$\hat{H}_{12} = \begin{pmatrix} \langle u_{ab} | H_{12} | u_{ab} \rangle & \langle u_{ab} | H_{12} | u_{ba} \rangle \\ \langle u_{ba} | H_{12} | u_{ab} \rangle & \langle u_{ba} | H_{12} | u_{ba} \rangle \end{pmatrix} \tag{1.64}$$

Die Diagonalterme, auch direktes Integral genannt ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \langle u_{ab} | H_{12} | u_{ab} \rangle &= \int \frac{(-e)|u_a(1)|^2(-e)|u_b(2)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dV_1 dV_2 \\ &= \int \frac{\varrho_a(1) \cdot \varrho_b(2)}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dV_1 dV_2 \\ &= \int \frac{\varrho_b(1) \cdot \varrho_a(2)}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dV_1 dV_2 \\ &= \langle u_{ba} | H_{12} | u_{ba} \rangle \end{aligned}$$

Die **elektrostatische Abschirmung** ist hierbei wie folgt definiert

$$J := \int \frac{\varrho_a(1) \cdot \varrho_b(2)}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dV_1 dV_2$$

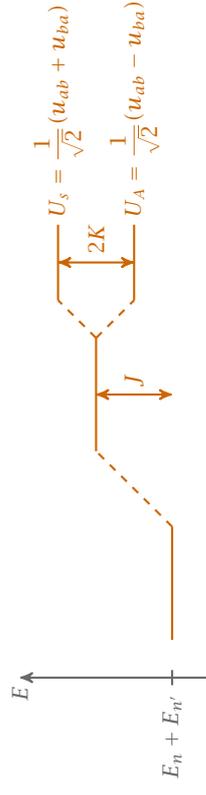
Die Außerdiagonalen Terme, auch Austauschintegral K genannt entsprechen einem »quantenmechanischen Interferenzterm« aufgrund der Ununterscheidbarkeit der beiden Elektronen. Er misst den Überlapp der Wellenfunktionen.

$$\det \begin{pmatrix} J - \Delta E & K \\ K & J + \Delta E \end{pmatrix} = 0$$

Dies führt auf die Eigenwerte

$$\Delta E = J \pm K$$

die die Aufspaltung in Abbildung 13 erklären.



► 13 Aufspaltung der Energieniveaus im Heliumatom.

Um der Frage nach zu gehen ob Übergänge zwischen u_s und u_A erlaubt sind, betrachten wir zunächst den **Austauschoperator** \hat{P}_{12} , dieser hat die Eigenschaft

$$\hat{P}_{12}u_A = -u_A$$

$$\hat{P}_{12}u_s = u_s.$$

Betrachten wir die Wirkung des Austauschoperators auf den Dipoloperator

$$\begin{aligned}\hat{P}_{12}\hat{\mathbf{d}}_{12} &= \hat{P}_{12}(\mathbf{e}\mathbf{r}_1 + \mathbf{e}\mathbf{r}_2) \\ &= (\mathbf{e}\mathbf{r}_1 + \mathbf{e}\mathbf{r}_2) \\ &= +\hat{\mathbf{d}}_{12}.\end{aligned}$$

Im Wirk der Austauschoperator auf d_{12} so gilt

$$\begin{aligned}\hat{P}_{12} \int u_s^* d_{12} u_A d\Omega &= - \int u_s^* d_{12} u_A d\Omega \\ &= 0\end{aligned}\quad (1.65)$$

Der Austausch der Bezeichnungen der beiden Elektronen in Abbildung 13 darf den Wert des Integrals nicht ändern, weshalb das in Gleichung (1.65) berechnete Matrixelement 0 ist. Die Symmetrieeigenschaft bezüglich P_{12} bleibt erhalten. Mit andern Worten, P_{12} ist eine Konstante der Bewegung.

Bemerkung: Die ganze Rechnung ist nur erlaubt falls

$$\Delta E \ll E_n, E'_n$$

ist (erste Ordnung Störungstheorie).

Im Grundzustand $E(1s^2)$ verschwindet u_A . Für die Energie gilt

$$E(1s^2) = 2E(1s) + \Delta E.$$

Hierbei entspricht $E(1s)$ der Grundzustandsenergie im Wasserstoffatom, also $-54,4 \text{ eV}$, ΔE berechnet sich aus

$$\left\langle \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right\rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{5}{4} Z \frac{e^2}{2a_0} = 34 \text{ eV}.$$

Abbildung 14 stellt den Grundzustand mit den von uns verwendeten Ansatz dar, sowie einen durch numerische Methoden bestimmten Wert. Die Abbildung zeigt, dass unser Lösungsansatz nicht die Exaktheit des numerischen Wertes entspricht und dementsprechend verbessert werden muss.

1.6.1 Angeregte Zustände

Im Folgenden wollen wir nun auch angeregte Zustände betrachten, wie z.B. für ein angeregte Elektron, sodass wir folgende Konfiguration erhalten

$$(1s)(n\ell).$$

Die erste Klammer entspricht dem inneren Elektron die zweite dem äußeren Elektron. Die Energie bezüglich $\text{He}^+(1s)$ ist dann

$$E = E_n + J \pm K.$$

2.) Mit Ansatz $\psi = f e^{i\phi}$ in die Gross-Pitavskii Gleichung (4.9) und nach Real- und Imaginärteil sortieren. Der Imaginärteil führt auf die Kontinuitätsgleichung, der Realteil dagegen auf die *Eulergleichung einer Quantenflüssigkeit*

$$\partial_t \mathbf{v} = -\frac{1}{m} \nabla p - \nabla \left(\frac{v^2}{2} \right) + \frac{1}{m} \nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} \right) - \frac{1}{m} \nabla V \quad (4.13)$$

Dies wir auch als die *Bewegungsgleichung einer Quantenflüssigkeit* bezeichnet, wobei der Term

$$Q = \frac{1}{m} \nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} \right)$$

als *Quantendruck* Q angesehen wird. Die perfekte Flüssigkeit hat links den Term

$$\partial_t \mathbf{v} - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}) = \dots$$

und rechts verschwindet der Term

$$\frac{1}{m} \nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} \right) = 0.$$

Es gilt zudem

$$p = n^2 \frac{\rho}{2}$$

für den Druck.

Bemerkung: Unterschied eines Bose-Einstein Kondensat zur klassischen Flüssigkeit

► Superfluid ist wirbelfrei \Rightarrow quantisierte Wirbel

► Quantendruck ($Q = \frac{1}{m} \nabla(\dots)$) \Rightarrow Tunneleffekt

Frage: Wie sieht die Dispersionsrelation einer Quantenflüssigkeit aus?

4.2.1 Anregung á la Bogoliubov

Bemerkung: Der folgende Ansatz ist ein guter, falls $na^3 \ll 1$ gilt.

Die nichtlineare Wellengleichung ist durch

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g|\psi|^2 \end{array} \right\} \psi = i\hbar \partial_t \psi \quad (4.14)$$

gegeben. Da wir an elementaren Anregungen (sehr kleinen Anregungen) interessiert sind, stören wir die Wellenfunktion ψ mit einer kleinen Störung $\delta\psi$. D.h. betrachten die Linearisierung um die Dispersionsrelation, an der wir ebenfalls interessiert sind zu bekommen. Für die Anregung im linearisierten Regime gilt

$$\psi \rightarrow \psi + \delta\psi \quad (4.15)$$

Daraus folgt die gewünschte Hierarchie

$$\xi \gg n^{-1/3} \gg a$$

Falls

$$\frac{Na}{a_{\text{HO}}} \gg 1 \implies \text{TF Regime} \implies R_{\text{TF}} \gg a_{\text{HO}}.$$

Damit erhalten wir insgesamt

$$R_{\text{TF}} > a_{\text{HO}} > \xi > n^{-1/3} > a \tag{4.11}$$

Bemerkung: Beispiel: In herkömmliche Fallen ($N = 10^5$, $\omega_{x/y} = 200 \text{ Hz}$, $\omega_z = 20 \text{ Hz}$) misst man

$$R_{\text{TF}} = 3 \mu\text{m} > a_{\text{HO}} = 760 \text{ nm} > \xi = 190 \text{ nm} > n^{-1/3} = 170 \text{ nm} > a = 5.5 \text{ nm} \quad \rightarrow$$

4.2 Hydrodynamische Gleichungen

Multiplizieren wir die Gross-Pitaevskii Gleichung (4.9) mit ψ^* von rechts und subtrahieren die mit komplexkonjugierte GP-Gleichung multipliziert mit ψ , also

$$GP\psi^* - GP^*\psi,$$

so erhalten wir

$$\partial_t |\psi|^2 - \nabla \left[\frac{\hbar^2}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right] = 0.$$

Gleichung (4.2) entspricht der **Kontinuitätsgleichung**, wobei

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{2mi} \frac{(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)}{|\psi|^2}$$

als Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} interpretiert werden kann. Mit $n = |\psi|^2$ folgt

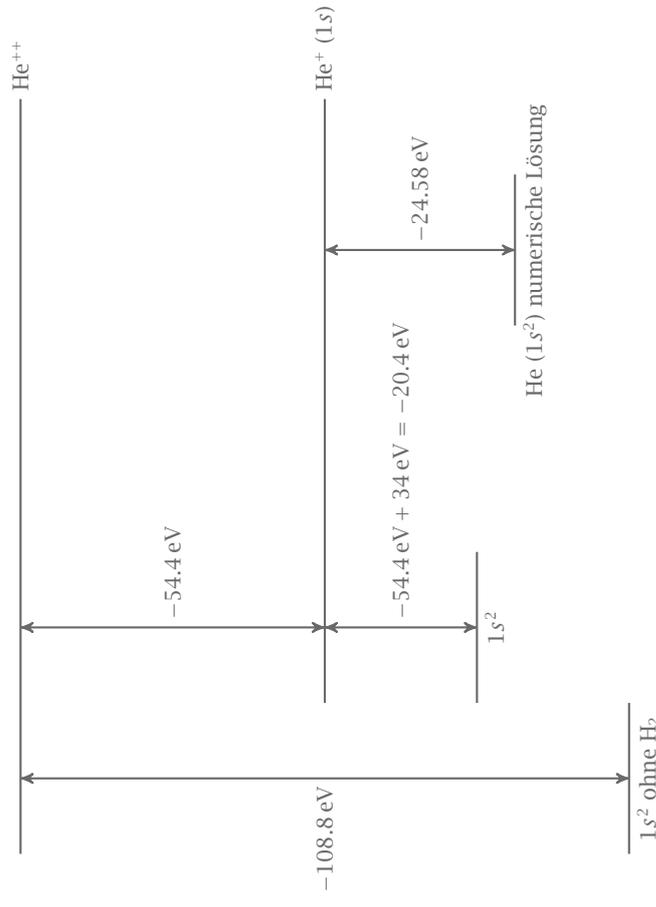
$$\partial_t n - \nabla(n\mathbf{v}) = 0 \tag{4.12}$$

die Teilchenzahlerhaltung. Betrachten wir den Ansatz für ψ

- 1.) $\psi = f e^{i\phi}$ und $|f|^2 = n$, $\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \phi$. Hierbei ist $|f|^2$ die lokale Dichte und $\nabla \phi$ das lokale Geschwindigkeitsfeld. Es gilt

$$\nabla \times \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \times (\nabla \phi) \equiv 0.$$

D.h. das Geschwindigkeitsvektorfeld ist wirbelfrei. Ein Wirbel in einem Bose-Einstein Kondensat kann nur um einen Punkt verschwindender Dichte entstehen!



► 1.4 Grundzustandsenergie des Heliumatoms unserer Rechnung und im Vergleich dazu der numerisch ermittelte Wert

J ist dafür verantwortlich, dass die ℓ -Entartung (vgl. Wasserstoffatom) aufgehoben wird, da die Exzentrizität des Zustands von ℓ abhängt.

Für hohe n ist die Abschirmung somit immer besser, d.h. Energien nähern sich dem des Wasserstoffatoms an.

1.6.2 Elektronenspin und Pauli-Prinzip

Wir betrachten die Wellenfunktion eines Teilchens

$$\psi(1) = u(1)\chi_{\pm}(1), \quad (1.66)$$

wobei \pm stellvertretend für Spin up/down zu verstehen ist. Wir betrachten nun nur χ_{\pm} bei Spin $s = 1$:

$$\chi_s = \begin{cases} \chi_+(1)\chi_+(2) & , M_s = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)] & , M_s = 0 \\ \chi_-(1)\chi_-(2) & , M_s = -1 \end{cases} \quad (1.67)$$

χ_s ist die *Triplettspinwellenfunktion*, die auch als *Orthohelium* bezeichnet wird.

Betrachten wir Spin $s = 0$:

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] \quad (1.68)$$

χ_A ist die *Singulettspinwellenfunktion*, die auch als *Parahelium* bezeichnet wird.

Nach Pauli gilt

$$\psi_A = \begin{cases} u_A\chi_s \\ u_s\chi_A \end{cases}, \quad (1.69)$$

zudem gilt das Interkombinationsverbot, d. h.

$$\Delta S = 0. \quad (1.70)$$

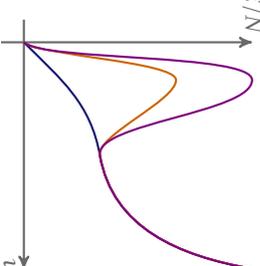
Dies gilt jedoch nur solange S und m_s gute Quantenzahlen sind. Diese werden durch die LS-Kopplung aufgehoben.

Der Grundzustand des Heliumatoms ist somit ein Singulett Zustand ($S = 0$) $1s^2$

Theorem Für viele Elektronen mit Einteilchenwellenfunktionen $\psi_{\alpha}(1) \dots \psi_{\gamma}(N)$ kann mit der *Slaterdeterminante* die antisymmetrische Wellenfunktion bestimmt werden.

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha}(1) & \dots & \psi_{\alpha}(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\gamma}(1) & \dots & \psi_{\gamma}(N) \end{vmatrix} \quad (1.71)$$

E/N



► 91 Energie $E(w)$ durch die Energie des ungestörten harmonischen Oszillators über der Gaußbreite w aufgetragen.

D.h. mittels dieser Gleichung ist es möglich die kritische Anzahl von Atomen zu bestimmen, bei der eine Bose-Einstein Kondensation möglich ist, falls $a < 0$.

Bemerkung: Bei der attraktive Wechselwirkung stehen somit der Quantendruck und die Wechselwirkungsenergie in Konkurrenz.

Wie wir bereits in Abbildung 90 gesehen haben stellt die Thomas-Fermi Näherung an den Rändern keine gute Lösung der Wellenfunktion dar (Sprünge und Unstetigkeiten). Die *Healinglänge* ξ eines Bose-Einstein-Kondensats stellt hierbei eine Korrektur zu Thomas-Fermi Näherung dar, es gilt

$$E_{\text{kin}} = E_{\text{vw}} \Rightarrow \xi^2 = \frac{1}{8\pi n a}.$$

Hierarchie der Längenskalen

Im folgenden Abschnitt sei a die Streulänge, a_{HO} die harmonische Oszillatorlänge, $n^{-1/3}$ der mittlere Teilchenabstand und ξ die Healinglänge. Um eine gewünschte Hierarchie dieser Größen zu erhalten betrachten wir wieder das GP-Energiefunktional (4.10) und vergleichen die kinetische und potenzielle Energie

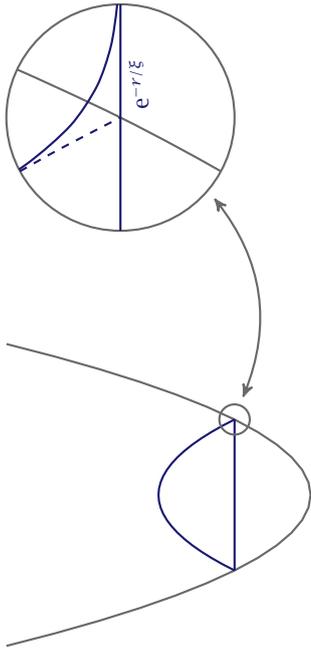
$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\text{Länge}^2} &= \frac{1}{2} m \omega^2 \text{Länge}^2 \\ \Rightarrow \text{Länge}^4 &= \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2}. \end{aligned}$$

Vergleichen wir zudem die kinetische Energie mit der Wechselwirkungsenergie

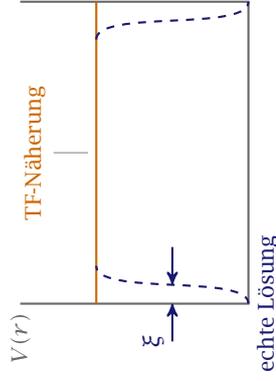
$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\text{Länge}} &= \frac{4\pi a \hbar^2}{m} n \\ \Rightarrow \text{Länge} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a n}} = \xi. \end{aligned}$$

Die Gross-Pitaevskii Gleichung ist nur für eine schwache Wechselwirkung $n a^3 \ll 1$ gültig

$$\frac{\xi^2}{n^{2/3}} = \frac{1}{8\pi n^{1/3} a} \gg 1.$$



► 89 Numerisch Lösung am Rand des Potentials $V(r)$.



► 90 Kastenpotential $V(r)$ unter der Lösung der Thomas-Fermi-Näherung und vergleichende numerische Lösung.

Betrachten wir nun den Fall $a < 0$, d.h. bei attraktiver Wechselwirkung. In der Falle muss hierbei die Anzahl der Atome unter einer kritischen Zahl N_{crit} liegen. Hierzu betrachten wir das *Gross-Pitaevskii Energiefunktional*

$$E[\phi] = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi|^2 + V_{\text{trap}} |\phi|^2 + \frac{g}{2} |\phi|^4 \right] d\mathbf{r}. \tag{4.10}$$

Ein einfaches Modell bietet ein Gauß-Ansatz der Form

$$\phi(\mathbf{r}) = \left(\frac{N}{w^3 a_{\text{Ho}}^3 \pi^{3/2}} \right)^{1/2} e^{-\frac{r^2}{2w^2 a_{\text{Ho}}^2}},$$

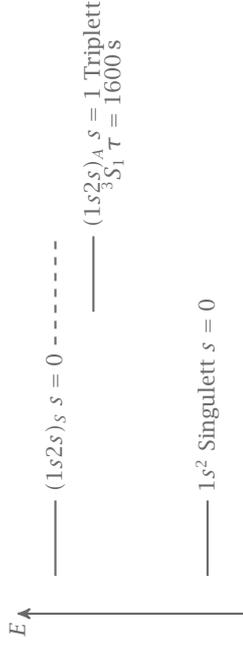
wobei w die Breite des Gauß ist. Vergleichen wir die mittels des Ansatzes gefundene Energie mit der Energie des ungestörten harmonischen Oszillator, so erhalten wir

$$\frac{E(w)}{N \hbar a_{\text{Ho}}} = \frac{3}{4} (w^{-2} + w^2) - (2\pi)^{-1/2} \frac{N|a|}{a_{\text{Ho}}} a^{-3}.$$

In Abbildung 91 sehen wir das Verhalten dieser Funktion. Eine explizite Auswertung führt zu

$$\frac{N_{\text{crit}}|a|}{a_{\text{Ho}}} = 0.57$$

ZU



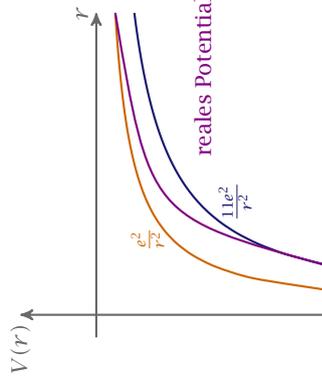
► 15 Singulett und Tripletaufspaltung des Heliumatoms

1.7 Alkali-Atome

► Beispiel Für die Elektronenkonfiguration von Natrium gilt

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s$$

Die ersten drei abgeschlossenen Schalen respektieren hierbei eine sphärische Symmetrie, d.h. die Zentralfeldnäherung ist gut. ◀



► 16 Zentralpotential und reales Potential für Alkali-Atome

Für große ℓ erhalten wir Wasserstoff-ähnliche Lösungen, für kleine ℓ ist die effektive Ladung E_{eff} größer als im Wasserstoff, deshalb erhalten wir eine stärkere Bindung. Für die Energie gilt

$$E_{n,\ell} = -\hbar c R \underbrace{\frac{1}{(n - \delta(\ell))^2}}_{n^*} \tag{1.72}$$

Hierbei ist $\delta(\ell)$ der sogenannte Quantendefekt. In Tabelle 4 sind für die verschiedenen Schalen explizite Werte gegeben. Dabei fällt auf, dass der Quantendefekt für große Quantenzahlen l abnimmt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Wellenfunktionen für große

Quantenzahlen l eine sehr geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit nahe des Kerns aufweisen. Sie spüren damit ein Potential, welches dem Wasserstoffatom ähnelt und sich quasi nur in der Kernladungszahl Z unterscheidet.

$\delta(s)$	1.35
$\delta(p)$	0.86
$\delta(d)$	0.01

- 4 Werte zum Quantendefekt der verschiedenen Schalen

In Tabelle 5 sind für n^* verschiedene Beispiele aufgeführt.

	Li	Na	K	Rb	Cs
n	2	3	4	5	6
n^*	1.6	1.6	1.7	1.8	1.9

- 5 Werte zu n^* zu verschiedenen Alkali Atomen

1.8 Grund- und angeregte Zustände von Mehrelektronenatomen

Im folgenden wollen wir die *Hundschen Regeln* besprechen:

1. Regel: S ist maximal, da so die Coulombabstoßung durch den Austauschterm minimiert wird.

2. Regel: L ist maximal, wobei $L = \sum \ell_i$

► **Beispiel** Die Elektronenkonfiguration von Phosphor ($Z = 15$) ist:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$$

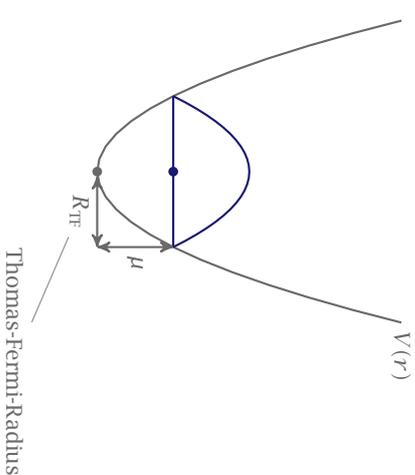
Die ersten vier Schalen sind abgeschlossen, die Valenzelektronen sind in $3p$. Nach den Hundschen Regeln gilt

$$\blacktriangleright \ell_1 = 1, \ell_2 = 1, \ell_3 = 1 \text{ mit jeweils } m_\ell = -1, 0, 1$$

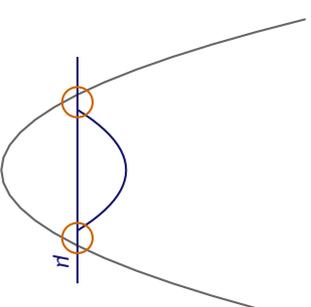
$$\blacktriangleright 3 \text{ Valenzelektronen: } S = 3 \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

► Mittels der Slaterdeterminante folgt für die Wellenfunktion ψ_{Space} :

$$\begin{aligned} \psi_{\text{Space}} &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} + (1) & 0(1) & - (1) \\ + (2) & 0(2) & - (2) \\ + (3) & 0(3) & - (3) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|+0-\rangle + |0-\rangle + |-+0\rangle - |-0+\rangle - |+ - 0\rangle - |0+ - \rangle) \end{aligned}$$



- 87 $V(r)$ unter der Thomas-Fermi Näherung mit eingezeichneten chemischen Potential μ und Thomas Fermi Radius R_{TF} .



- 88 Veranschaulichung der Unstetigkeit am Rand von $V(r)$ unter der Thomas-Fermi Näherung.

Bemerkung: Eine Quantenflüssigkeit passt sich dem Potential an.

Die *Gross-Pitaevskii Gleichung*, bzw. die nichtlineare Schrödingergleichung hat die Form

$$i\hbar\psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.9)$$

wobei $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ und a die Streulänge ist. Unter der *Thomas-Fermi Näherung* versteht man hierbei die Annahme, dass der Wechselwirkungsterm in Gleichung (4.9) größer ist als der Anteil der kinetischen Energie, d.h. wir können diesen vernachlässigen. Die Lösung ist in diesem Fall

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{g} (\mu - V(\mathbf{r})).$$

► Für $g = 0$ ist $E_{\min}(b) = \frac{3}{2}\hbar\omega$ mit $b_{\min} = a_{\text{HO}} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$, d.h. wir erhalten den Grundzustand des dreidimensionalen harmonischen Oszillators.

► Für $g > 0$ (repulsive Wechselwirkung), betrachte dazu $b = a$

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{int}}}{E_{\text{kin}}} &= \frac{gN}{a_{\text{HO}}^3 \hbar \omega} \frac{4}{3(2\pi)^{3/2}} \\ &= \frac{4 \cdot 4\pi}{3(2\pi)^{3/2}} \underbrace{\hbar^2 \frac{aN}{ma_{\text{HO}}} \frac{m\omega}{\hbar\hbar\omega}}_{\approx 1} \\ &= \frac{a}{a_{\text{HO}}} N, \end{aligned}$$

d.h. für $N \gg \frac{a_{\text{HO}}}{a}$ ist $E_{\text{int}} \gg E_{\text{kin}}$.

Für große N können wir die **Thomas-Fermi-Näherung** anwenden

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{p^2}{2m} + V(r) + g|\psi|^2 \\ \Rightarrow [V(r) + g|\psi|^2]|\psi\rangle &= \mu|\psi\rangle \end{aligned}$$

wobei μ das **chemische Potential** ist. Es beschreibt die Kosten an Energie, die bezahlt werden müssen um 1 Teilchen dem System zuzuführen. Somit folgt

$$\begin{aligned} \mu &\propto \frac{m\omega^2}{2} R_{\text{TF}}^2 \\ n &\propto |\psi|^2 \propto n_0 \left(1 - \frac{r^2}{R_{\text{TF}}^2}\right) \quad \text{und} \quad n_0 = \frac{N_\mu}{g}, \end{aligned}$$

hierbei ist R_{TF} der **Thomas-Fermi Radius** der in Abbildung 87 veranschaulicht ist. Das chemische Potential ist durch die Normierung gegeben

$$1 = \int |\psi|^2 dV = \frac{\mu}{g} \frac{8\pi}{15} R^3,$$

somit erhalten wir für μ

$$\boxed{\mu = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{15Na}{a_{\text{HO}}}\right)^{2/5}} \tag{4.8}$$

Wie in Abbildung 88 zu sehen ist, stellt die Thomas-Fermi-Näherung eine unphysikalische Lösung am Rand dar, da sie hier unendlich ist. Eine echte Lösung, bspw. mittels einer numerischen Methode bestimmt ist in Abbildung 89 zu sehen. Die Größe ξ stellt hierbei die **Healing Länge** dar.

Kastenpotential

Die Thomas-Fermi-Näherung führt auch beim Kastenpotential auf eine unphysikalische Lösung am Rand, wie in Abbildung 90 zu sehen ist.

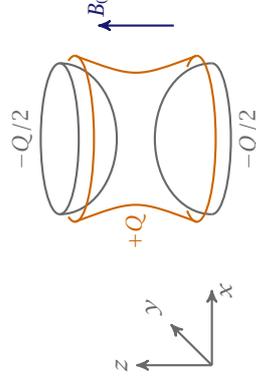
Dies führt auf $M_L = 0$, also $L = 0$. Der Grundzustand von Phosphor ist somit ${}^4S_{3/2}$.

	2	1	0	-1	-2
3/2	Pauli-Verbot	Pauli-Verbot	↑ ↑ ↑ + 0	↑ ↑ ↑ + 0	↑ ↑ ↑ + 0
1/2	↑ ↑ ↑ + 0				
-1/2	↑ ↑ ↑ + 0				
-3/2	Pauli-Verbot	Pauli-Verbot	↑ ↑ ↑ + 0	↑ ↑ ↑ + 0	↑ ↑ ↑ + 0

► 6 Tabelle für den Grundzustand und der angeregten Zustände (ohne Hund'sche Regeln, sondern nur mit Pauli-Prinzip)

1.9 Geonium

Im folgenden wird eine **Penning Falle** wie in Abbildung 17 betrachtet.



► 17 Aufbauprinzip einer Penning Falle

Für das elektrische Potential gilt:

$$\begin{aligned} \phi_{\text{elektr.}} &= A(x^2 + y^2 - 2z^2) \\ &= A(r^2 - 2z^2), \end{aligned}$$

d.h. die Falle ist in z -Richtung orientiert, wobei

$$\omega_z = \sqrt{\frac{4eA}{m_e}}$$

gilt. In der xy -Ebene führt dies zu einer Kreisbewegung mit der **Zyklotronfrequenz** ω_C :

$$\omega_C = \frac{eB_0}{m_e c},$$

sowie zu einem $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_r &= e \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{r} \\ &= 2eA r \mathbf{r} \\ &= \frac{m_e}{2} \omega_z^2 r \mathbf{r} \end{aligned}$$

wobei F_r der elektrischen Kraft entspricht. Betrachten wir zusätzlich die Lorentzkraft so gilt:

$$m_e \omega^2 r = e \underbrace{\frac{\omega r}{c} B_0}_B - \underbrace{\frac{m_e}{2} \omega_z^2 r}_E$$

Durch multiplizieren mit m_e und r sowie umformen führt für $\omega_C \gg \omega_z$ auf:

$$\omega^2 - \omega_C \omega + \frac{\omega_z^2}{2} = 0$$

Für $\omega_C \gg \omega_z$ folgen die beiden Lösungen:

$$\omega_1 = \omega_C' \approx \omega_C - \frac{\omega_z^2}{2\omega_C}$$

$$\omega_2 = \omega_m \approx \frac{\omega_z^2}{2\omega_C}$$

Hierbei liegt die Zyklotronfrequenz im Bereich von ~ 100 GHz und die **Magnetronfrequenz** von ~ 100 kHz.

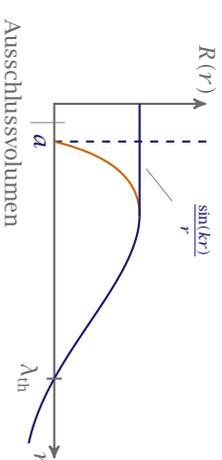
Bemerkung: Eine 2-dimensionale Kreisbewegung hat die Niveaus eines 1-dimensionalen harmonischen Oszillators (siehe Landauivcaus). \rightarrow

Eine Quantenmechanische Rechnung liefert die Energie:

$$E_{n_+, n_-, k, q} = \hbar \omega_s n_+ + \hbar \omega_z \left(n_+ + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_+ \left(n_+ + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_- \left(n_- + \frac{1}{2} \right)$$

Mit

$$\begin{aligned} \omega_z &= \left(\frac{q\Phi_0}{md^2} \right)^2 \\ \omega_s &= -g \frac{qB}{2mc} \omega_{\pm} \\ &= -\frac{gm}{2mc} \pm \left[\left(\frac{qB}{2mc} \right)^2 - \frac{q\Phi_0}{2md^2} \right]^{1/2} \end{aligned}$$



► 85 Radialfunktion $R(r)$. Die Radialfunktion schneidet die r -Achse bei der Streulänge a und der thermischen deBroglie Wellenlänge λ_{th} .

4.1.2 Grundzustand eines BEC in einer harmonischen Falle

Wir betrachten das harmonische Potential

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (4.5)$$

und berechnen das Eigenfunktional für eine Testfunktion

$$\psi = A \cdot e^{-r^2/(2b^2)}, \quad (4.6)$$

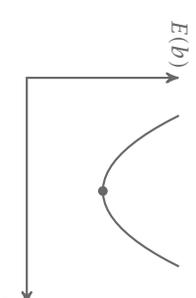
wobei b die Breite des Gauß ist. Der Hamiltonoperator hat die Form

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V + g|\psi|^2.$$

Somit gilt

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = E(\psi) = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + V(r) |\psi|^2 + \frac{4\pi \hbar^2 a}{m_{\mu}} \underbrace{|\psi|^4}_{=g} \right] dr, \quad (4.7)$$

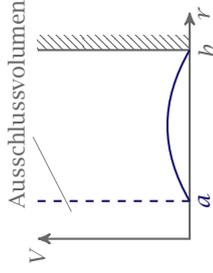
d.h. aufgrund der Isotropie bleibt bei der Integration über das gesamte Volumen nur noch die r Integration übrig. Mit dem Ansatz (4.6) wird die Energie nur abhängig von b sein. Abbildung 86 zeigt die Energie in Abhängigkeit des Parameters b . Insgesamt erhalten wir



► 86 Energie aus (4.7) aufgetragen über der Potentialbreite b .

$$\frac{E(b)}{N} = \frac{3}{4} \hbar \omega \left\{ \frac{a_{HO}^2}{b^2} + \frac{b^2}{a_{HO}^2} \right\} + \frac{gN}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{b^3},$$

hierbei ist a_{HO} die harmonische Oszillator Länge (Ausdehnung des Gaus im HO-Potential).



► 8.4 Kastenpotential mit eingezeichneter Streulänge a und Wellenfunktion. Der Teil links von der gestrichelten Linie wird als Ausschussvolumen bezeichnet, dass aus dem Pseudopotential resultiert.

$$P(r) = rR(r)$$

für die Radialgleichung. Beschränken wir uns auf s -Wellen ($\ell = 0$) gilt

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \\ P(r) \end{array} \right\} P(r) = EP(r). \quad (4.2)$$

Es gelten die Randbedingungen

$$P(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r = a \\ 0 & \text{für } r = b \end{cases}.$$

Damit folgt

$$P = C \sin(k(r-a)) \quad \text{mit} \quad k(b-a) = \pi n \\ E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mu} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_\mu (b-a)^2}.$$

Betrachten wir den Fall $a \ll b$, d.h. wenn die Streulänge viel kleiner ist als der Kasten, so erfolgt eine Entwicklung

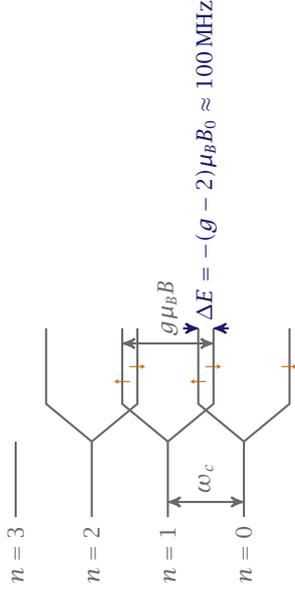
$$E_{n=1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_\mu b^2} \left(1 - \frac{a}{b}\right)^{-2} \approx E(a=0) + \frac{\hbar^2 \pi^2 a}{m_\mu b^3} + \dots$$

Der erste Term beschreibt hierbei die Nullpunktenergie im Kasten ohne Wechselwirkung, der zweite Term die erste Korrektur, die linear in a ist (eine lineare Energieverschiebung). Der Faktor b^3 hat hierbei die Einheit eines Volumens. Es zeigt sich, dass die Störung proportional zu a ist. Die Radialwellenfunktion $R(r)$ ist dann (mit Entwicklung um kleine r)

$$R(r) = \frac{P(r)}{r} = \frac{C \sin(k(r-a))}{r} \quad (4.3)$$

$$\approx \left(1 - \frac{a}{r}\right). \quad (4.4)$$

D.h. die harte Kugel kostet Energie. Die Radialfunktion ist in Abbildung 85 zu sehen.



► 18 Energieniveaus bei der Penning Falle

lässt sich die Frequenz ω_s ausdrücken durch

$$\omega_s = \frac{g}{2} (\omega_+ + \omega_-).$$

Durch die Messung der Anomalie a

$$a = \frac{g}{2} - 1 = \frac{\omega_s}{\omega_+ + \omega_-} - 1 \\ = \frac{\omega_s - \omega_+ - \omega_-}{\omega_+ + \omega_-}.$$

Da alle Frequenzen experimentell hinreichend genau bestimmt werden können, ist die Anomalie eine stabil zu messende Größe.

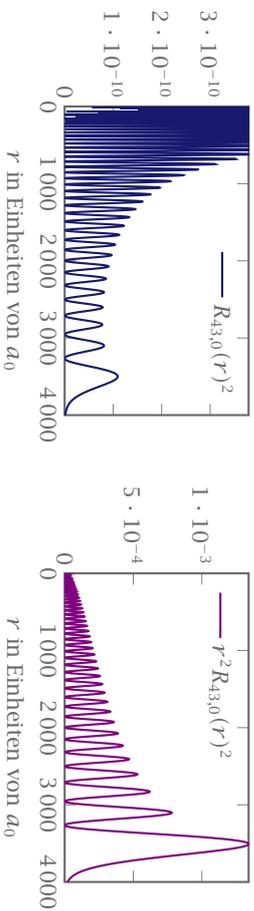
1.10 Rydbergatome

1.10.1 Grundlegende Eigenschaften von Rydbergatomen

Ein *Rydberg-Atom* liegt dann vor, wenn sich das äußerste Elektron in einem Zustand mit Hauptquantenzahl n befindet, die weit über den bei Atomen im Grundzustand vorkommenden Maximalwert von $n = 6$ liegt. Gemäß dem *Korrespondenzprinzip* geht dabei die quantenmechanische Beschreibung in die klassische Beschreibung über, wodurch gewisse Effekte im Rahmen der klassischen Mechanik beschrieben und verstanden werden können.

In Abbildung 19 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte, sowie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des $43s$ -Zustands (nur Radialteil) beim Wasserstoffatom über dem Atomradius aufgetragen.

Anhand dieser Abbildung wird der Übergang zur klassischen Mechanik besonders deutlich. An den Umkehrpunkten, i.e. in der Nähe des Atomradius ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am größten, was in völliger Analogie zum Klassischen ist (man denke dabei z.B. an einen harmonischen Oszillator). Des Weiteren stellen wir fest, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nahe am Kern verschwindend gering ist, wohingegen diese beim Wasserstoff-Grundzustand



► 19 Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (blau) und Aufenthaltswahrscheinlichkeit (lila) des $43s$ -Zustands beim Wasserstoffatom. Signifikant ist hierbei vor allem die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Umkehrpunkt.

dort ihr Maximum besitzt (am Kernort selbst ist auch beim Grundzustand die Aufenthaltswahrscheinlichkeit Null). Dies ist ein typisches Merkmal für Rydbergatome, wobei diese Aufenthaltswahrscheinlichkeit noch kleiner wird, wenn der Drehimpuls maximiert wird. Weitere typische Eigenschaften von Rydbergatomen sind:

- Die **Bindungsenergie** skaliert mit $\frac{1}{n^2}$. Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, dass aufgrund der hohen Anregung Feinstruktur- und Hyperfeinstrukturwechselwirkung vernachlässigt werden können und damit die Bindungsenergie durch $E_n = -\frac{R_y}{n^2}$ mit der Rydbergkonstanten R_y gegeben ist.
- Die **Aufspaltung der Energieniveaus** skaliert mit $\frac{1}{n^3}$
- Der **Atomradius** nimmt mit n^2 zu.
- Die **Lebensdauer** (spontaner Zerfall) von Rydbergzuständen nimmt mit n^3 zu. Durch die Schwarzkörperstrahlung kommt es allerdings zu stimulierten Emissionsprozessen, wodurch die Lebensdauer verkürzt wird (dazu später mehr)
- Die **Dipolmomente** skalieren mit $\approx n^2$
- Die **Polarisierbarkeit** skaliert mit n^7

1.10.1.1 Zur Lebensdauer von Rydbergatomen (am Beispiel von Wasserstoff und Rubidium)

Anhand der obigen Auflistung sehen wir, dass Rydbergatome ≈ 1000 mal länger leben als normale angeregte Zustände. Die Linienbreite eines Übergangs zwischen zwei Niveaus ist dabei durch den Einstein-A-Koeffizienten gegeben:

$$\Gamma = A_{n\ell - n'\ell'} = \frac{\omega^3}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \left| \langle n, \ell, m_\ell | \hat{d} | n', \ell', m_{\ell'} \rangle \right|^2$$

Daraus ergibt sich schließlich die Lebensdauer eines angeregten Zustands gemäß

$$\tau_{\text{spont}}^{-1} = \Gamma_{\text{tot}} = \sum_{n', \ell'} A_{n\ell - n'\ell'}$$

4 Ultrakalte Atome

4.1 Bose Einstein Kondensation

Merkregel Sei n die Teilchendichte, C eine reelle Konstante so gilt für die kritische Temperatur der **Bose Einstein Kondensation** T_c

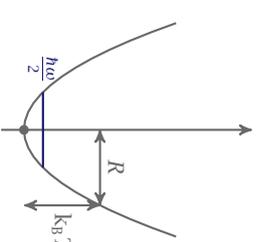
$$k_B T_c = C \cdot \text{Energie}(n, \hbar, m) \\ = C \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3},$$

wobei die Energie von \hbar , n und m abhängt, bzw. über die Energie-Impuls Beziehung. In einer harmonischen Falle wie etwa in Abbildung 83 gilt

$$n = \frac{N}{R^3} \quad \text{und} \quad R \propto \sqrt{\frac{k_B T}{m\omega_0^2}} \\ \Rightarrow k_B T_c = C \hbar \omega_0 N^{1/3}.$$

Eine explizite Rechnung zeigt, dass $C = 0.94$. Typischerweise gilt

$$k_B T_c \gg \frac{\hbar\omega_0}{2}. \quad (4.1)$$



► 83 Harmonisches Potential mit eingezeichnetener Nullpunktsenergie und Energie bei der kritischen Temperatur für die Bose Einstein Kondensation.

4.1.1 Effekt der Atom-Atom Wechselwirkung

Unter Verwendung eines Harten-Kugel-Potential, auch Pseudopotential genannt, lösen wir die Schrödingergleichung für zwei Teilchen in einem 3-dimensionalen Kastenpotential wie in Abbildung 84 zusehen ist. Dazu verwenden wir den Lösungsansatz

Neben diesen Zerfällen durch spontante Emission von Photonen kommt es aber auch durch die Schwarzkörperstrahlung zu stimulierten Emissionsprozessen, welche die Lebensdauer der angeregten Zustände verkürzen. Die Rate für stimulierte Emission ist dabei durch den effektiven Einsteinkoeffizienten $\tilde{A} = \tilde{n}A$ gegeben. Hierbei ist $\tilde{n} = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$ die mittlere Photonenzahl der Schwarzkörperstrahlung. Die durch Schwarzkörperstrahlung induzierten Lebensdauern sind dabei gegeben durch

$$\tau_{bb}^{-1} = \sum_{n', \ell'} \tilde{A}_{n\ell - n'\ell'}$$

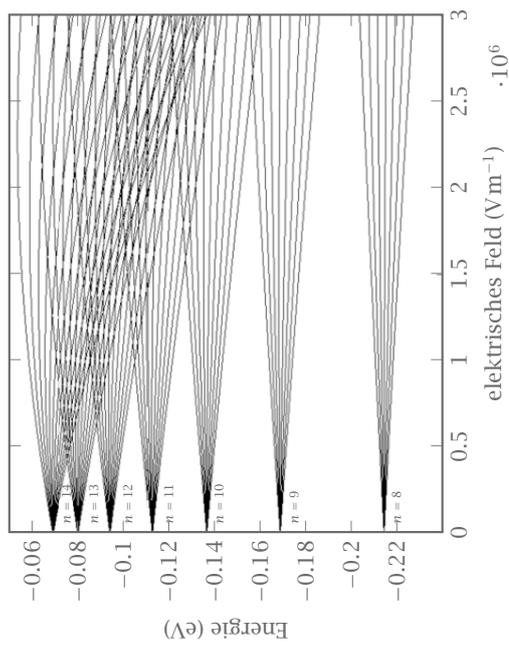
Die resultierende Lebensdauer ergibt sich dann aus Superposition beider einzelnen Lebensdauern also $\tau_{\text{spont}+bb}$. Dabei berechnet man für den 43s-Zustand des Wasserstoffatoms:

$$\tau_{\text{spont}+bb} = 46 \mu\text{s}$$

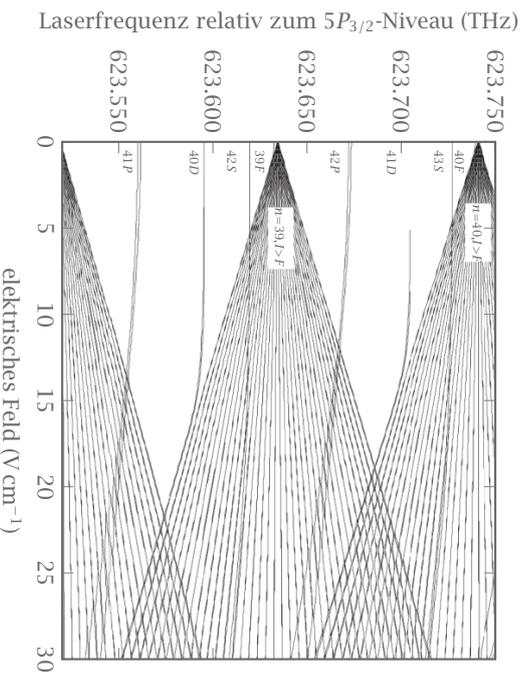
Bei Raumtemperaturen dominiert hierbei jedoch der Zerfall durch die Schwarzkörperstrahlung. Demnach bietet es sich an die Temperatur so weit wie möglich zu senken, wenn man mit Rydbergatomen arbeitet.

1.10.2 Rydbergatome im elektrischen Feld

Wegen ihrer vergleichsweise großen räumlichen Ausdehnung und der großen Anzahl an eng benachbarten, bzw. fast entarteten Energieniveaus reagieren Rydbergatome besonders sensitiv auf elektrische Felder. Dabei weisen jedoch Rydbergzustände mit unterschiedlichen ℓ -Quantenzahlen verschiedene Stark-Effekte auf. Nicht entartete Zustände weisen dabei einen quadratischen Stark-Effekt auf und entartete Zustände den linearen Stark-Effekt. Dies ist in den Abbildung 20 und Abbildung 21 für Wasserstoff und Rubidium dargestellt.



► 20 Stark-Effekt im Wasserstoff



► 21 Stark-Effekt im Rubidium

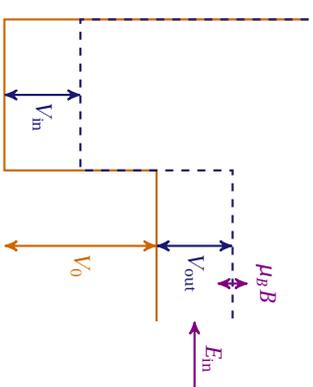
1.10.3 Sonstiges

1.10.3.1 Detektion von Rydbergatomen

Da es sich bei Rydbergatomen um stark angeregte Elektronenzustände handelt, deren Energie unweit von der Kontinuumsschwelle entfernt ist, können diese sehr leicht ionisiert werden. So führt bereits etwa eine Störung mit der Umgebung zur Ionisierung. Dadurch kommt ein Elektronenfluss zustande, der dazu genutzt werden kann, um Rydbergatome zu detektieren.

1.10.3.2 Verwendung von Rydbergatomen

Dadurch das Rydbergzustände (vor allem bei niedrigen Temperaturen) besonders langlebig sind, stellen Rydbergatome einen bedeutenden Schritt in Richtung zur Realisierung eines Quantencomputers dar.



► 81 Modell zweier übereinanderliegenden Kastspotentialen, mit einem Höhe variierenden Magnetfeld.

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} - V_0 & \Lambda \\ \Lambda & \frac{p^2}{2m} + V_{in-V_0+\mu_B B} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} & 0 \\ 0 & \frac{p^2}{2m} + V_{out} + \mu_B B \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

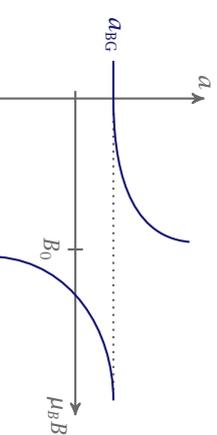
gegeben. Als Lösungsansatz der Schrödingergleichung setzen wir eine zwei komponentige Wellenfunktion an

$$r \rightarrow \infty, \quad \begin{pmatrix} \alpha \sin kr + \delta_0 \\ \beta e^{k'r} \end{pmatrix},$$

wobei

$$k = \sqrt{E} \quad \text{und} \quad k' = \sqrt{V_{out} - E}.$$

Die numerische Lösung diese Systems ist in Abbildung 82 zu sehen. Für die Streulänge a



► 82 Numerische Lösung der Schrödingergleichung mit Hamiltonoperator (3.15).

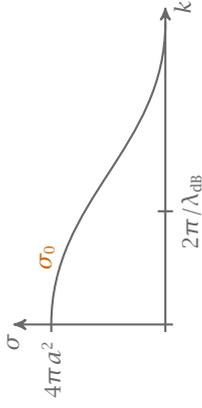
gilt

$$a = a_{BG} \left(1 - \frac{\Delta}{(B - B_0)} \right) \quad (3.16)$$

und somit führt $B = B_0$ zu einer Divergenz der Streulänge.

Bemerkung: Für jede Temperatur existiert eine ausgezeichnete Partialwelle, d.h. die thermische Energie entspricht der eines gebundenen Zustandes.

Für die s -Welle ist die Temperaturabhängigkeit in Abbildung 79 zu sehen. Die Reichweite des



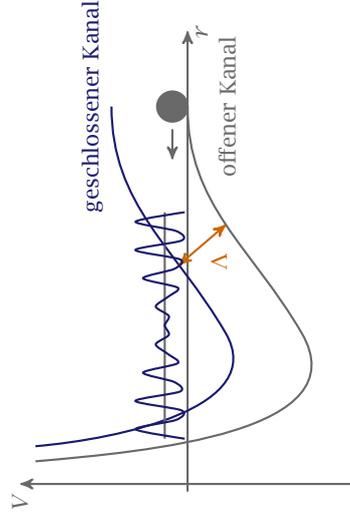
► 79 Wirkungsquerschnitt über der Temperatur einer s -Welle

Potenzials wird über die van der Waalslänge bezeichnet. D.h. r_0 entspricht im vdW-Fall

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{r_0} \right)^2 = \frac{C_6}{r_0^6} \implies r_0 = \left[\frac{2m}{\hbar^2} C_6 \right]^{\frac{1}{4}}. \tag{3.14}$$

3-3 Feshbachresonanzen

Im Folgenden betrachten wir zwei Molekülpotentiale, die nahezu übereinander liegen, wie sie in Abbildung 80 zu sehen sind. Die beiden Kanäle seien über eine anisotrope Kopplung Λ miteinander verbunden. Mit anderen Worten führt jede anisotrope Wechselwirkung zu



► 80 Zwei Molekülpotentiale, die nahezu übereinander liegen. Das untere wird als offener Kanal, das obere als geschlossener Kanal bezeichnet. Λ ist ein Kopplung.

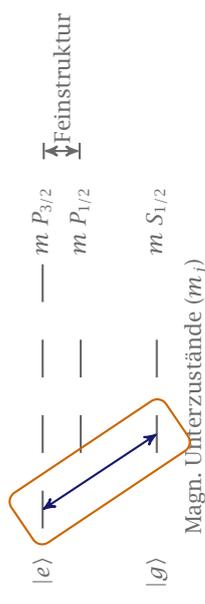
einer Kopplung Λ zwischen den Potentialen. Als vereinfachte Modellvorstellung könne zwei übereinanderliegende Kastenpotentials mit unterschiedlicher Kastentiefe V_0 dienen, wobei die Höhe des einen Kastens mittels eine Magnetfeldes variiert werden kann. Siehe dazu Abbildung 81. Der Hamiltonoperator \hat{H} des Systems ist durch

2 Atom-Licht Wechselwirkung

2-1 Zwei Niveau System: Rabi Oszillation

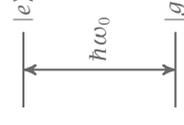
2.1.1 Jaynes-Cummings-Modell

Das *Jaynes-Cummings-Modell* stellt eine vollständige quantenmechanische Beschreibung der Atom-Licht Wechselwirkung dar. Betrachten wir zum Beispiel die verschiedenen Zustände eines Atoms wie in Abbildung 22



► 22 Atomniveaus, wobei $|e\rangle$ ein angeregte Zustand sein soll und $|g\rangle$ der Grundzustand

Durch Auswahlregeln, wie etwa der Polarisation des Lichts und durch Frequenzschärfe, bspw. durch ein Laser kann das Problem (oft) auf zwei Niveaus reduziert werden, wie in Abbildung 23 zu sehen ist.



► 23 Zwei Niveau System

Definition: Wir definieren folgenden Operator

$$\hat{\sigma}_{ij} := |i\rangle \langle j| \quad i, j = e, g \tag{2.1}$$

D.h. wir können einen Erzeuger $\hat{\sigma}_{eg}$ und Vernichter $\hat{\sigma}_{ge}$ der atomaren Anregung finden der

Form

$$\hat{\sigma}_{eg} = |e\rangle \langle g| \tag{2.2}$$

$$\hat{\sigma}_{ge} = |g\rangle \langle e| \tag{2.3}$$

×

► **Beispiel** Wirkung von (2.2) und (2.3) auf den Grund-, bzw. angeregten Zustand

$$\hat{\sigma}_{eg} |g\rangle = |e\rangle \langle g|g\rangle = |e\rangle$$

$$\hat{\sigma}_{ge} |e\rangle = |g\rangle \langle e|e\rangle = |g\rangle$$

$$\hat{\sigma}_{ge} |g\rangle = |g\rangle \langle e|g\rangle = 0$$

►

Hintereinanderanführung von (2.2) und (2.3) ergibt

$$\hat{\sigma}_{eg}\hat{\sigma}_{ge} = |e\rangle \langle g|g\rangle \langle e|$$

$$= |e\rangle \langle e| = \hat{\sigma}_{ee}$$

$$\langle \hat{\sigma}_{eg}\hat{\sigma}_{ge} \rangle = \langle \psi|e\rangle \langle e|\psi \rangle$$

$$= |\langle e|\psi \rangle|^2 = P_e$$

P_e ist hierbei die Wahrscheinlichkeit, dass das Atom im angeregten Zustand ist, P_g wäre dementsprechend die Wahrscheinlichkeit, dass das Atom im Grundzustand ist.

Der **Hamiltonoperator des Zwei Niveau System** lautet dementsprechend

$$\hat{H}_{\text{Atom}} = \hbar\omega_0\hat{\sigma}_{eg}\hat{\sigma}_{ge} \tag{2.4}$$

Quantisiertes Lichtfeld

Im Folgenden betrachten wir ein Quantisierungsvolumen V .

$$V = L^3.$$

Das elektrische Feld $E(\mathbf{r}, t)$ in der Box kann zerlegt werden in eine Summe aus ebenen Wellen (Fourier Transformation).

$$E(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, p} [\mathbf{e}_p E_{\mathbf{k}} \exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + c.c.]$$

Hierbei gilt für den Wellenvektor

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}, \quad k_i = \frac{2\pi m_i}{L}$$

$E_{\mathbf{k}}$ entspricht der Amplitude der Mode und \mathbf{e}_p dem Polarisationsvektor (zu jedem \mathbf{k} gehören 2 orthogonale Polarisationen). Der Faktor $\epsilon_{\mathbf{k}}$ ist nur ein Vorfaktor und ist

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_0 V}}$$

Für die Streulänge a gilt

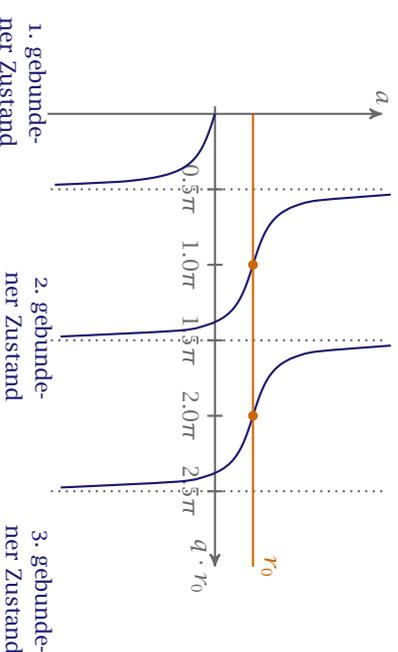
$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta}{k}$$

$$= -\lim_{k \rightarrow 0} -r_0 + \frac{\tan(\sqrt{q^2 + k^2}r_0)}{\sqrt{q^2 + k^2}}$$

und somit

$$a = r_0 - \frac{\tan(qr_0)}{q} \tag{3.12}$$

Tragen wir a über qr_0 auf, so erhalten wir Abbildung 78. Wir sehen, dass in der Nähe der Resonanzen die Streulängen extrem negativ oder positiv werden, bzw. sich nicht im Bereich der meisten Atome bei r_0 befinden.



► 78 Resonanzen der Streulänge in Abhängigkeit von qr_0

3.2.2 Temperaturabhängigkeit der s-Wellenstreuung

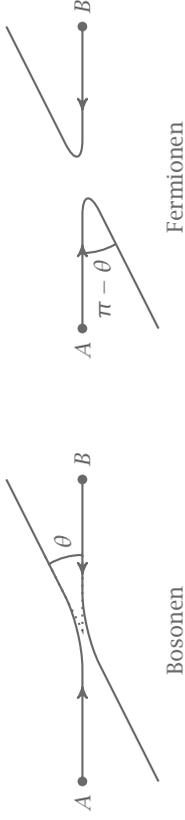
Für den Wirkungsquerschnitt und die Streuamplitude von s-Wellen gilt

$$\sigma_0(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(\delta_0(k)) = |f_0|^2 \int d\Omega$$

$$f_0(k) = \frac{1}{k \cot(\delta_0(k)) - ik} \approx \frac{1}{-1/a - ik}$$

Somit ergibt sich für verschiedene Größen von a

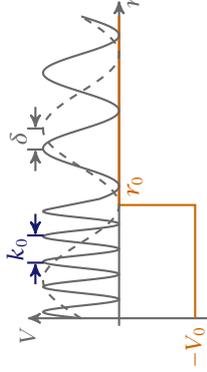
$$\sigma_0(k) = \frac{4\pi a^2}{1 + k^2 a^2} \implies \begin{cases} \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} & \text{für } a \rightarrow \infty \\ \sigma_0 = 4\pi a^2 & \text{für } a \ll \lambda_{\text{dB}} \end{cases} \tag{3.13}$$



► 76 Interpretation der Streuamplituden

3.2.1 Streuung am Kastenpotential

Im Folgenden betrachten wir das Verhalten einer von links nach rechts laufenden Welle in ein Kastenpotential, wie es in Abbildung 77 zu sehen ist. Hierbei gelten die Anschlussbedingung



► 77 Kastenpotential mit einfallender Welle von links sowie einfallende Welle ohne Potential (freie Lösung)

und Stetigkeitsbedingung

$$\begin{aligned} \psi_1(r < r_0) &\approx \sin(\sqrt{k^2 + q^2}r) \\ \psi_2(r > r_0) &\approx \sin(kr + \delta), \end{aligned}$$

wobei

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_{\text{th}}, \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0.$$

Aus den Anschlussbedingungen

$$\begin{aligned} \psi_1(r_0) &= \psi_2(r_0) \\ \psi_1'(r_0) &= \psi_2'(r_0)' \end{aligned}$$

folgt für δ

$$\delta = -kr_0 + \arctan\left(\frac{k \tan(\sqrt{q^2 + k^2}r_0)}{\sqrt{q^2 + k^2}}\right). \tag{3.11}$$

Bemerkung: Die Polarisation erfolgt in $p = x, y$ oder in $p = +, -$, letzteres entspricht einer sphärischen Basis.

Ein endliches Quantisierungsvolumen V hat diskrete Moden zur Folge. Für $V \rightarrow \infty$ erhalten wir also ein kontinuierliches Spektrum, d.h. die Summe geht in ein Integral über und zwar der Form

$$\sum_{\mathbf{k}} \dots \rightarrow \int \dots d^3k.$$

Planck: Jede einzelne Mode kann nur diskrete Energien annehmen! ✕

Die klassische Amplitude E_k geht also in quantenmechanische Operatoren über.

$$E_k, E_k^* \rightarrow \hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger.$$

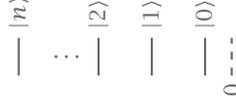
Für die vollständige Herleitung sei auf die Literatur verwiesen. Das Ergebnis ergibt sich somit zu

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, p} \mathbf{e}_p \epsilon_k \left[\hat{a}_{\mathbf{k}, p} \exp(-i\omega_k t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \hat{a}_{\mathbf{k}, p}^\dagger \exp(i\omega_k t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right] \tag{2.5}$$

Jede einzelne Mode verhält sich wie ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator, d.h. für eine Mode \mathbf{k}, p gilt:

$$E_{\mathbf{k}, p} = \hbar\omega_k \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Das Energiespektrum, bzw. die Zustände sind in Abbildung 24 dargestellt.



► 24 Energien des HO zu verschiedenen Zuständen $|n\rangle$ für eine bestimmte Mode k .

$|n\rangle$ entspricht dem Zustand mit n Photonen in der Mode. Dieser wird auch als **Fock Zustand** (engl. number state) bezeichnet.

$|0\rangle$ entspricht dem »Vakuuzustand« (0 Photonen), wobei $E_0 = \hbar\omega_0/2 > 0$, die Nullpunktenergie ist. Sie ist eine Konsequenz der Heisenbergschen Unschärferelation (vgl. harmonischer Oszillator).

Im folgenden wollen wir nun Erzeuger und Vernichter einführen (Übergang ins Heisenbergbild, bzw. Wechselwirkungsbild):

$$\hat{a}_{k,p}^\dagger = e^{-i\omega t} \hat{a}_{k,p}^\dagger \quad (2.6)$$

$$\hat{a}_{k,p} = e^{i\omega t} \hat{a}_{k,p} \quad (2.7)$$

Bemerkung: Der Übergang ins Heisenbergbild stellt sich hier als sinnvoll heraus, da dann die Zeitabhängigkeit eliminiert werden kann. \rightarrow

$\hat{a}_{k,p}^\dagger$, bzw. $\hat{a}_{k,p}$ sind Erzeuger, bzw. Vernichter eines Photons in den Moden \mathbf{k}, p . Wir betrachten genau eine Mode mit Frequenz

$$\omega_L = 2\pi f_L$$

und definierter Polarisation. Die Wirkung der Vernichter und Erzeuger ist:

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$\hat{a} |n+1\rangle = \sqrt{n+1} |n\rangle.$$

Der *Hamiltonoperator des »single-mode« Feldes* ist dementsprechend

$$\hat{H}_{\text{Feld}} = \hbar \omega_L \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.8)$$

Durch verschieben des Nullpunkts, kann jedoch der hintere Term vernachlässigt werden. Hierbei ist

$$n = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

der *Anzahloperator*.

Zustand des Gesamtsystems

Für die Wellenfunktion gilt

$$|\psi\rangle = |\text{Atom}\rangle \otimes |\text{Feld}\rangle = |\text{Atom, Feld}\rangle.$$

► *Beispiel* »bare states«:

$$|e, n\rangle, \quad |g, n+1\rangle$$

Bemerkung: 1.) Der maximale Wirkungsquerschnitt (unitarity limit) für $\sin^2 \delta_\theta = 1$ ist

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \approx \lambda_m^2.$$

2.) Nützliche Beziehung für s-Wellen ($\ell = 0$) sind

$$f_0(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0(k)} \sin \delta_\theta$$

$$\text{Im} \frac{1}{f_0} = -k$$

$$\text{Re} \frac{1}{f_0} = k \cot \delta_0(k)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow f_0(k) &= \frac{1}{\text{Re}\left(\frac{1}{f_0}\right) + i \text{Im}\left(\frac{1}{f_0}\right)} \\ &= \frac{1}{k \cot \delta_0 + ik} \end{aligned}$$

3.) Für $T \rightarrow 0$, d.h. $k \rightarrow 0$ trägt nur die s-Welle zur Streuung bei. Das Problem reduziert sich auf die Berechnung einer einzigen Phase δ_0 oder f_0

$$\begin{aligned} f_0 &= \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k} e^{i\delta_0(k)} \sin \delta_0(k) \\ &= a, \end{aligned}$$

wobei a die *Streulänge* ist und somit

$$\sigma_0 = 4\pi a^2$$

4.) Für identische Teilchen gilt, dass die Gesamtwellenfunktion (anti-)symmetrisch unter Punktspiegelung werden muss (Pauli Prinzip) d.h.

$$\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}, \quad \theta \rightarrow \theta - \pi, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi.$$

Die Streuwellenfunktion ist somit

$$\phi_S(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r},$$

wobei + für Bosonen und – für Fermionen einzusetzen ist, dies ist in Abbildung 7-6 dargestellt. Es zeigt sich, dass für identische Bosonen nur gerade Partialwellen besetzt (s, d, \dots) und für Fermionen nur die ungeraden (p, f, \dots) sind. Im weiteren Sinne bedeutet dies, dass für $k \rightarrow 0$ ein ein-komponentiges Gas aus Fermionen ideal ist! \rightarrow

Bemerkung: ► Die relevante Skala ist die van-der Waals Länge ≈ 5 nm.

► Eine einzige Phase reicht aus um den Streuprozess zu charakterisieren, diese muss jedoch experimentell gefunden werden! \rightarrow

Wie wir also gesehen haben, kann die Streulänge als effektiver Radius für ein Hart-Kugelpotential angesehen werden. Dieses Potential bezeichnet man auch als Pseudopotential.

Das Ergebnis ist somit eine Wahrscheinlichkeit für die Streuung in Einheiten einer Fläche. Für die Streuung in ein Raumwinkelement $d\Omega$ gilt

$$d\sigma(E, \theta, \varphi) = |f(E, \theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (3.5)$$

Bemerkung: Der klassische Grenzfall des Schattenwurfs hinter einem Streuobjekt erklärt sich durch destruktive Interferenz von ϕ_0 und ϕ_S in Vorwärtsrichtung. \rightarrow

Für isotrope Potentiale gilt die Drehimpulserhaltung, d.h. wir können eine Partialwellenzerlegung nach den Drehimpulseigenfunktionen machen

$$\phi_{\mathbf{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{u_{\ell}(r)}{r} P_{\ell}(\cos \theta). \quad (3.6)$$

Hierbei sind $P_{\ell}(\cos \theta)$ die Legendre-Polynome und es wurde eine magnetische Quantenzahl $m = 0$ vorausgesetzt. Setzen wir Gleichung (3.6) in die Schrödingergleichung ein, erhalten wir

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\mu}} u''_{\ell}(r) + [E - V_{\text{eff}}] u_{\ell}(r) = 0, \quad (3.7)$$

wobei

$$E_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_{\mu} r^2} \quad (3.8)$$

ein effektives Potential mit Potentialbarriere ist.

Lösung

- 1.) Für ein freies Teilchen, also $V(r) = 0$ addieren sich die Partialwellen zu einer ebenen Welle.
- 2.) Für $V(r) \neq 0$ aber $V(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$ (Kurzreichweitig) erhalten wir die Lösung wie im freien Fall bis auf eine Phasenverschiebung

$$\delta_{\ell}(k)$$

die durch den »inneren« Teil $V(r) \neq 0$ erzeugt wird. Für die Streuamplitude dargestellt in den Drehimpulseigenfunktionen ergibt sich

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell + 1) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta). \quad (3.9)$$

Der *Streiquerschnitt* ist somit

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell} \quad (3.10)$$

Hierbei gilt

$$\sigma_{\ell}(k) = (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}.$$

Ein Übergang von $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$ bei festgehaltener Photonenzahl n steht im Folgenden mit der Frequenz ω_0 in Verbindung. Ist diese Frequenz etwa so groß wie die Frequenz des Übergangs

$$|i, n\rangle \rightarrow |i, n \pm 1\rangle \quad i = e, g, \quad (2.9)$$

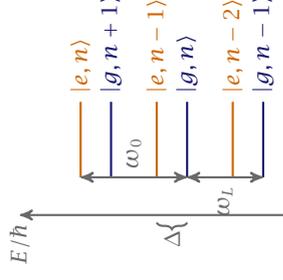
also

$$\omega_L \approx \omega_0$$

so hat dies zur Folge, dass

$$\Delta = \omega_0 - \omega_L \ll \omega_0$$

gilt. Dabei ist Δ diejenige Frequenz, die den Übergang in das nächstgelegene Energieniveau beschreibt. (siehe Abbildung 25).



► 25 »bare states« Leiter

Wechselwirkung

In Erinnerung an die elektrischen Dipolnäherung wissen wir, dass die Wellenlänge des Atoms viel kleiner ist, als die Wellenlänge des treibenden Feldes. D.h. wir entwickeln $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ um $\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} = 0$, da $r \approx 10^{-10}$ m und $k \approx 10^7$ m $^{-1}$ und somit

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} \approx 10^{-3}$$

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 1 + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \dots \approx 1$$

Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung ist dementsprechend (wobei $\hat{\mathbf{d}} = e\hat{\mathbf{r}}$)

$$\hat{H}_{\text{WW}} = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} \quad (2.10)$$

$$= e \sum_{i,j} |i\rangle \langle i| \mathbf{r} |j\rangle \langle j| \quad (2.11)$$

Für ein zwei-Niveau-System, gilt $i, j = e, g$. Wobei

- ▶ $\mu_{i,j} = e \langle i | \mathbf{r} | j \rangle$ das Dipolmatrixelement ist
- ▶ $\mu_{e,e} = \mu_{g,g} = 0$
- ▶ $\mu_{e,g} = \mu_{g,e}$

Damit vereinfacht sich die Summe zu

$$\hat{H}_{\text{WW}} = \mu_{e,g} (\hat{\sigma}_{eg} + \hat{\sigma}_{ge}) \tag{2.12}$$

Wird der Operator für E (single mode) benutzt gilt

$$\hat{E} = \epsilon_p \epsilon_k (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung kann dann umgeschrieben werden.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{WW}} &= -\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{E} \\ &= \hbar \Omega (\hat{\sigma}_{eg} + \hat{\sigma}_{ge}) (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \end{aligned}$$

Hierbei ist

$$\Omega = \frac{\mu_{e,g} \cdot \epsilon_p \cdot \epsilon_k}{\hbar}$$

die *Rabi Frequenz*. Sie gibt im wesentlichen die Stärke der Kopplung an. Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung hat nach expliziten ausmultiplizieren vier Terme, zwei »energieerhaltende« Terme und zwei »nicht energieerhaltende« Terme. Die energieerhaltenden Terme sind:

- $\hat{\sigma}_{eg} \cdot \hat{a}$: Erzeugung der atomaren Anregung und Vernichtung eines Photons
- $\hat{\sigma}_{ge} \cdot \hat{a}^\dagger$: Vernichtung der atomaren Anregung und Erzeugung eines Photons

Sie koppeln eine zusammenliegendes Paar von »bare states«. Die »nicht energieerhaltenden« Terme sind dementsprechend:

- $\hat{\sigma}_{ge} \cdot \hat{a}$: Vernichtung der atomaren Anregung und Vernichtung eines Photons
- $\hat{\sigma}_{eg} \cdot \hat{a}^\dagger$: Erzeugung der atomaren Anregung und Erzeugung eines Photons

Sie stellen eine Kopplung zwischen den übernächsten Paaren dar.

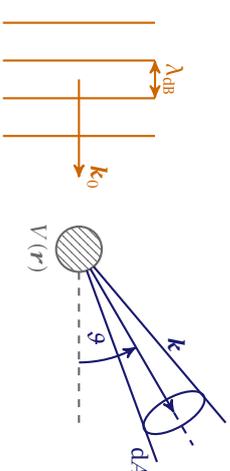
▶ *Beispiel*

$$\hat{\sigma}_{eg} \cdot \hat{a} |e, n\rangle \rightarrow |e, n-1\rangle \tag{2.13}$$

$$\hat{\sigma}_{ge} \cdot \hat{a}^\dagger |e, n-1\rangle \rightarrow |g, n\rangle \tag{2.14}$$

$$\hat{\sigma}_{ge} \cdot \hat{a} |e, n\rangle \rightarrow |g, n-1\rangle \tag{2.15}$$

$$\hat{\sigma}_{eg} \cdot \hat{a}^\dagger |g, n\rangle \rightarrow |e, n+1\rangle \tag{2.16}$$



▶ 75 Streuung einer einfallenden, ebenen Welle ϕ_0 an einem Streupotential $V(r)$ und die resultierende auslaufende Streuwelle ϕ_S .

Ihrer Linearität ist diese Gerade durch die Superposition von ein- und auslaufender Welle gegeben.

$$\phi = \phi_0 + \phi_S \tag{3-2}$$

d.h.

$$\left[\frac{p^2}{2m_\mu} + V(r) \right] \phi(r) = E \phi(r), \tag{3-3}$$

hierbei ist m_μ die reduzierte Masse.

Bemerkung: Behandlung im Schwerpunktsystem, d.h. wir machen eine Separation der Schwerpunktbewegung. Dazu führen wir die reduzierte Masse m_μ ein und betrachten den Fall gleicher Massen, also $m_1 = m_2 = m$ und erhalten

$$m_\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2}.$$

Die Energie E ist abhängig von der Temperatur

$$E = k_B T = \frac{p^2}{2m_\mu}.$$

Ab jetzt betrachten wir $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}_0$ als thermischem Mittelwert des Impulses. Später muss dann über eine thermische Impulsverteilung gemittelt werden. →

Um den richtigen Ansatz zu erhalten, verdeutlichen wir uns das Verhalten der auslaufenden Streuwelle für $r \rightarrow \infty$

$$\phi_S(r \rightarrow \infty) = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}, \tag{3-4}$$

wobei $f(\theta, \varphi)$ die Streuamplitude der Welle ist.

Ziel der Streutheorie ist die Bestimmung der *Wirkungswert* σ_{tot} . Der Wirkungsquerschnitt ist hierbei die Anzahl der Streueignisse geteilt durch die Anzahl der Teilchen, genauer gesagt

$$\sigma_{\text{tot}} \triangleq \frac{\# \text{ Streueignisse}}{\text{Zeit} \cdot \frac{\# \text{ Teilchen}}{\text{Zeit} \cdot \text{Fläche}}}.$$

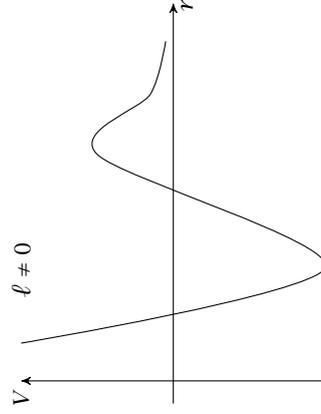
gibt es eine endliche Anzahl gebundener Zustände und damit auch eine endliche Anzahl von Nullstellen der Wellenfunktion.

$$\begin{aligned} V_{\text{pot}} &= \frac{C_6}{a^6} \\ &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} \\ &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} = E_{\text{kin}} \\ \Rightarrow a &= \left[\frac{C_6 2m}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{4}} \approx 100a_0. \end{aligned}$$

wobei a_0 der Bohrradius und a die **Streulänge** ist.

Bemerkung: Liegt der letzte gebundene Zustand auf dem Dissoziationszustand, liegt Resonanz vor, d.h. die Abschätzung gilt nur wenn der Abstand der Zustände endlich ist. \rightarrow

Im folgenden vereinfachen wir das Problem auf eine Raumdimension. Ist der Drehimpuls ℓ ungleich Null, existiert eine Zentrifugalbarriere, vgl. Keplerproblem. vergeiche hierzu Abbildung 74. D.h. das vereinfachte Potential gilt nur bei geringen Temperaturen, ansonsten



► 74 Zentrifugalbarriere bei $\ell \neq 0$

muss ein allgemeines Potential beachtet werden.

3-2 Streuproblem

Im Folgenden betrachten wir eine von links einfallende unendlich ausgedehnte, ebene Welle die auf ein Streuhindernis (bspw. ein Atom) $V(r)$ fällt. Resultat ist eine um den Winkel θ auslaufende Welle ϕ_s die in ein Raumelement dA gestreut wird. Die Abstände der einfallenden Wellenfronten entsprechen der de Broglie Wellenlänge λ_{dB} . Siehe dazu Abbildung 75. Gesucht wird eine stationäre Lösung der Schrödingergleichung. Aufgrund

Für $\Delta \ll \omega_0$ können die Beiträge der »nicht energieerhaltenden« Terme vernachlässigt werden (auch »**Rotating Wave Approximation**« genannt).

Vollständiger Hamiltonoperator

Der vollständige Hamiltonoperator setzt sich dementsprechend aus \hat{H}_{Atom} , \hat{H}_{field} und \hat{H}_{WW} zusammen:

$$\hat{H}_{\text{ges}} = \hbar\omega_L \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar\omega_0 \hat{\sigma}_{ge} \hat{\sigma}_{eg} - \hbar\Omega (\hat{\sigma}_{eg} \hat{a} + \hat{\sigma}_{ge} \hat{a}^\dagger) \quad (2.17)$$

Der Hamiltonoperator (2.17) in Matrixdarstellung hat eine Blockstruktur bestehend aus 2×2 Matrizen

$$\hat{H}_{\text{ges}} = \begin{pmatrix} (2 \times 2) & 0 \\ (2 \times 2) & \ddots \\ 0 & (2 \times 2) \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Dieser Hamiltonoperator wird auch als **Jaynes-Cummings Hamiltonoperator** bezeichnet und ist exakt lösbar. Die Eigenzustände werden auch als »dressed states« bezeichnet. Zu jedem n existieren 2 Eigenzustände.

$$|\pm, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(C_g^\pm |g, n+1\rangle \pm C_e^\pm |e, n\rangle \right)$$

Die Variablen C_g^\pm und C_e^\pm können mittels Diagonalisierung von (2.17) bestimmt werden.

Bemerkung: 1.) Experimentelle Umsetzung in »High-Fines-Resonatoren« (z.B.: optisch und Grundzustand, Mikrowelle und Rydbergatom)

2.) Auch ohne Photonen ($n = 0$) gibt es eine Kopplung. Deren Stärke hängt vom Vorfaktor ε_k ab. Durch »Überhöhung« einer Mode im Resonator kann diese Kopplung verstärkt werden (Vakuum Rabi Splitting)

3.) Ein Laserfeld (kohärenter Zustand) ist eine Superposition von Fock-Zuständen

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

Für übliche Laserintensitäten

$$\langle \hat{n} \rangle = \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle \rightarrow \infty \Rightarrow n + 1 \approx n$$

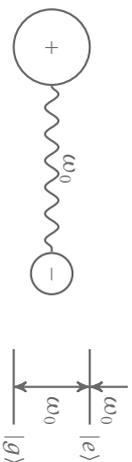
$$\sqrt{\frac{\sigma_n^2}{\langle \hat{n} \rangle}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\langle \hat{n} \rangle}} \rightarrow 0$$

D.h. die Quantisierung kann oft vernachlässigt werden. \rightarrow

2.1.2 Zwei-Niveau-Atome

Lorentz Modell

Das halbklassische *Modell nach Lorentz* beschreibt ein an ein Atom gebundenes Elektron, welches durch ein elektrisches Feld zur Oszillation angeregt wird. Die mathematische Modellierung entspricht der Differentialgleichung eines gedämpften harmonischen Oszillators, d.h. Atom und Elektron sind mit einer »Feder« gekoppelt (aus klassischer Sicht). Während im klassischen Fall kontinuierliche Werte erreicht werden, sind sie quantenmechanisch diskret (Vgl. Abbildung 26).



► 26 Darstellung des Lorentz Modells

Bemerkung: Wesentlicher Unterschied der der zum klassischen Lorentz Modell gemacht werden muss:

- Im klassischen kann beliebig viel Energie, bzw. Intensität im Oszillator gesteckt werden, d.h. die Amplitude wird beliebig groß
- Hier gibt es allerdings eine Grenze der Amplitude (angeregtes Niveau) von dort geht es dann auch wieder zurück

Das klassische Lichtfeld wird hierbei durch

$$E = E_0 \cos(\omega_L t)$$

beschrieben. Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung ist also

$$\hat{H}_{\text{WW}} = -\hat{d} \cdot E.$$

Es gilt $\hat{d} = e\hat{r}$ und \hat{r} ist der Ort des Elektrons gemessen vom Kernort. Die zeitabhängige Schrödingergleichung ist somit:

$$i\hbar\partial_t \psi = (\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{WW}}) \psi. \tag{2.19}$$

Die Eigenzustände von \hat{H}_0 sind hierbei

$$\hat{H}_0 \psi_{1,2} = E_{1,2} \psi_{1,2}.$$

Die Wellenfunktion ψ stellt dabei eine Superposition der beiden Eigenfunktionen ψ_1 und ψ_2 dar

$$\psi = c_1(t) \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2(t) \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}. \tag{2.20}$$

3 Atom-Atom Wechselwirkung

3.1 Streutheorie

Die für die Streutheorie wichtigen Längenskalen sind der mittlere Teilchenabstand $n^{-1/3}$ und die Reichweite der Wechselwirkung a .

Wir betrachten das Regime eines verdünnten, wechselwirkenden Gases, d.h.

$$na^3 \ll 1. \tag{3.1}$$

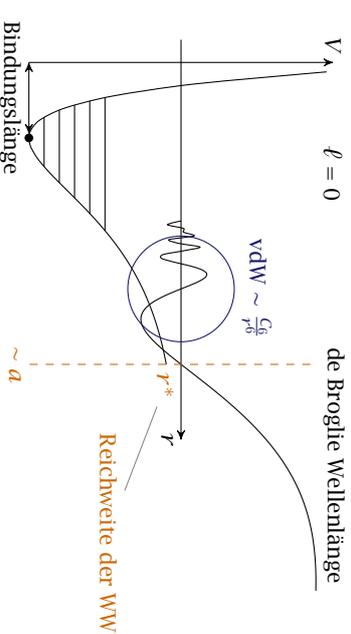
Für $na^3 \gg 1$ liegt ein stark korreliertes Gas vor (siehe Vielteilchentheorie). Ein weitere wichtige Länge ist die *de Broglie Wellenlänge* λ_{dB} , die typischerweise von der Größe der optischen, bzw. thermischen Wellenlänge ist, d.h.

$$\lambda_{th} \sim \lambda_{opt} \gg a.$$

Die Schlussfolgerung ist, dass eine quantenmechanische Streutheorie nötig ist um das Problem zu lösen!

Bemerkung: Was ist a bzw. $\sigma \propto a^2$?

Um dieser Frage nachzukommen, betrachten wir Abbildung 73. Zu sehen ist ein typisches



► 73 Moleküllpotential und ein von rechts einfallendes Teilchen mit de-Broglie Wellenlänge

Moleküllpotential und ein von rechts einfallendes Teilchen mit de-Broglie Wellenlänge. Hierbei

ψ_1 und ψ_2 müssen Dipolübergangserlaubte Zustände sein, z.B.: beim Wasserstoffatom slp -Zustände. Mit den Anfangsbedingungen

$$c_1(t=0) = 1$$

$$c_2(t=0) = 0$$

und dem Dipolmoment

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{d}(t) \rangle_{|\psi(t)\rangle} &= \int \psi^*(t) \hat{\mathbf{d}} \psi(t) dV \\ &= \tilde{e} c_2^* c_1 \langle 1 | \mathbf{r} | 2 \rangle e^{i\omega_0 t} + \tilde{e} c_1^* c_2 \langle 2 | \mathbf{r} | 1 \rangle e^{-i\omega_0 t}, \end{aligned}$$

welches aus den Diagonaleinträgen besteht, folgt

$$|c_2|^2 = \frac{\omega_R^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right).$$

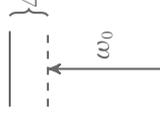
Für ω_R gilt hierbei

$$\omega_R = \langle 1 | e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_0 | 2 \rangle = \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \int \psi_1^* \mathbf{r} \psi_2 dV \quad (2.21)$$

Dies entspricht der Rabi-Frequenz, wenn die Verstimmung $\Delta = 0$ ist. Allgemein jedoch ($\Delta \neq 0$) gilt (Vgl. Abbildung 27)

$$\Omega = \sqrt{\omega_R^2 + \Delta^2} \quad (2.22)$$

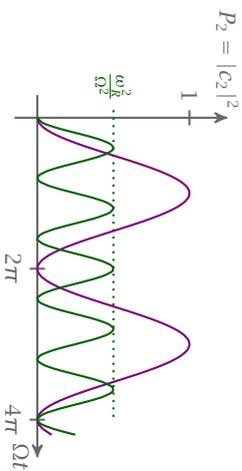
Dies ist die verallgemeinerte **Rabi-Frequenz**.



► 27 Darstellung der Verstimmung $\Delta \neq 0$

Abbildung 28 zeigt:

- Hier sieht man schön den Sättigungseffekt. Er oszilliert, steigt also nicht beliebig an für wachsende Ωt (im klassischen Fall würde ein beliebiges Anwachsen beobachtet werden). Die Charakteristik zeigt, dass nur 2 Niveaus existieren.
- Der Anfängliche »response« für lila und grün ist genau gleich. Man kann wie folgt argumentieren: »Bei kurzen Pulsen kann noch nicht entschieden werden ob Ω resonant (also ohne Verstimmung) oder nicht ist.«
- Das zwei-Niveau-System entspricht somit einem Pseudospin.



► 28 Rabi-Frequenz für verschiedenen Δ

► Wenn c_1 noch mit dazu kommt, bekommt man eine Phase mit (Minusvorzeichen). Erst nach 4π ist man wieder beim Ausgangszustand (vgl. Spin).

► 2π Puls: $|1\rangle \rightarrow -|1\rangle$

► 4π Puls: $|1\rangle \rightarrow |1\rangle$

► π Puls: $c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle \rightarrow -i[c_1 |2\rangle + c_2 |1\rangle] \hat{=} -i\text{SWAP}$

► $\pi/2$ Puls: $|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|2\rangle)$, d.h. die Population im Grund- und angeregten Zustand ist gleich.

Bemerkung: Es zeigt sich, dass es zwischen einem zwei-Niveau-Atom und Spin 1/2 einen Isomorphismus gibt. \rightarrow

Dichtematrix

Im folgenden wollen wir die **Dichtematrix** einführen.

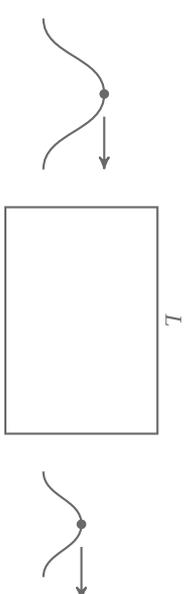
$$\begin{aligned} \varrho &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 & c_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & |c_2|^2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \varrho_{11} & \varrho_{12} \\ \varrho_{21} & \varrho_{22} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Wie jede 2×2 -Matrix lässt sich auch die Dichtematrix mit Hilfe der Pauli-Matrizen und der Einheitsmatrix ausdrücken.

$$\varrho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + R_z & R_x - iR_y \\ R_x + iR_y & 1 - R_z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \tag{2.23}$$

Dabei ist \mathbf{R} der sog. Blochvektor. In unserem Fall ergibt sich dieser zu

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ -w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varrho_{12} + \varrho_{21} \\ -i(\varrho_{12} - \varrho_{21}) \\ \varrho_{11} - \varrho_{22} \end{pmatrix}. \tag{2.24}$$



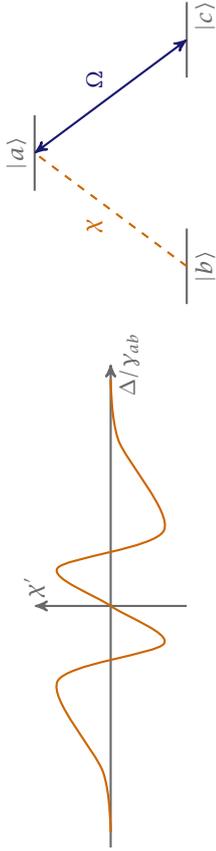
► 72 Einlaufender Puls in ein Medium der Länge L .

Im Folgenden betrachten wir ein in ein Medium einfallenden Impuls, wie in Abbildung 72. Hierbei ist die Zeit τ_d

$$\begin{aligned} \tau_d &= L \left(\frac{1}{v_{gr}} - \frac{1}{c} \right) \\ &= \frac{Ln_{gr}}{c} \\ &= Ln\sigma \frac{\chi_{ab}}{\Omega_c^2} \end{aligned} \tag{2.71}$$

die Pulsverzögerung, d.h. die Zeit die dauert bis der Puls durch das Medium hindurch gedrun-gen ist. In der Definition der Gruppengeschwindigkeit kommt jedoch nicht die Deformation eines Puls, die durch das Eindringen in das Medium verursacht wird zu tragen, d.h. lediglich das Maximum beschreibt ob der Puls durch das Medium hindurch ist oder nicht. Hierbei beschreibt der Term $Ln\sigma$ die optische Dichte und der Gesamtausdruck auf der rechten Seite von Gleichung (2.71) die inverse, dispersive Dichte, d.h.

$$\tau_d = Ln\sigma = \frac{\chi_{ab}}{\Omega_c^2} = \Delta\nu. \tag{2.72}$$



► 71 Drei-Niveua-System mit Kopplungslaser und χ' .

bestimmt ist. Für kleine δ und $\gamma_{cb} \ll \gamma_{ab}$ (vergleiche Abbildung 71) erhalten wir

$$\chi' = \frac{3}{4\pi^2} n \lambda^3 \frac{2\gamma_{ab}}{\omega_c} \delta + \mathcal{O}(\delta^2).$$

Hierbei gilt für den **Brechungsindex** n bezüglich einer Taylorentwicklung um $\delta = 0$

$$n = \sqrt{1 + \chi'} \tag{2.69}$$

$$\approx 1 + 3n\lambda^2 \lambda \frac{\gamma_{ab}}{\Omega_c^2} \delta. \tag{2.70}$$

Bemerkung: Für die Gruppengeschwindigkeit ist nur der Realteil interessant, bzw. eine Entwicklung um 0 geht mit einem Extremum von χ'' einher, d.h. der Imaginärteil verschwindet. →

Für die **Gruppengeschwindigkeit** v_{gr} gilt

$$v_{gr} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{\delta=0} = \frac{c}{n + \omega_P \frac{dn}{d\omega_P}}.$$

ω_P bezieht sich hierbei auf die Frequenz des Übergangs im drei-Niveau-System. Berücksichtigen wir jetzt n als die Dichte, so gilt

$$\begin{aligned} \omega_P \frac{dn}{d\omega_P} &= 3n\lambda^2 2\pi\nu_P \lambda \frac{\gamma_{ab}}{\Omega_c^2} \\ &= n\sigma c \frac{\gamma_{ab}}{\Omega_c^2} \\ &\stackrel{!}{=} n_{gr}. \end{aligned}$$

n_{gr} wird als **Gruppenindex** bezeichnet, der von einer Dichte n und dem Wirkungsquerschnitt abhängt. Die Phasengeschwindigkeit des durchlaufenden Pulses entspricht hierbei der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. Die Gruppengeschwindigkeit dagegen ist langsam.

Bemerkung: Es gilt zu beachten, dass für die **Phasengeschwindigkeit** v_{ph} im Vakuum

$$v_{ph} = \left. \frac{\omega}{k} \right|_{\delta=0} = \frac{c}{n} = c$$

gilt.

Für den reduzierten Hamiltonoperator ($H_{red} = H_{Atom} + H_{WV}$) – der daraus folgt, dass über $n - 1$ Moden ausgespart wurde, sodass nur ein einziger übrig bleibt – ergibt sich in Matrixdarstellung

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_R \\ \omega_R^* & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.25}$$

Aus der Von-Neumann-Gleichung

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] \tag{2.26}$$

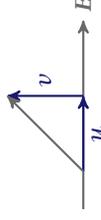
lassen sich die **Blochgleichungen** ableiten. Diese lauten

$$\dot{u} = \delta v \tag{2.27}$$

$$\dot{v} = -\delta u + \omega_R w \tag{2.28}$$

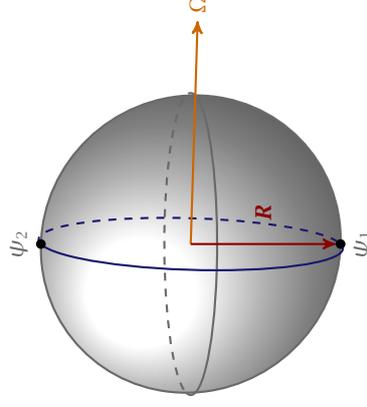
$$\dot{w} = -\omega_R v. \tag{2.29}$$

u ist hierbei die Komponente in Phase, v die Komponente außer Phase ($\pi/2$) mit treibenden Feld. Nur u liefert einen Beitrag zur Lichtkraft, siehe Abbildung 29. Der Blochvektor gibt die



► 29 Zur Veranschaulichung von u und v im Bezug zur Lichtkraft

Position auf der **Blochsphäre** an, siehe dazu Abbildung 30. Alle Überlagerungszustände von



► 30 Blochsphäre

ψ_1 und ψ_2 mit maximalen Dipolmoment liegen auf der Äquatorebene der Blochsphäre. Des

weiteren lassen sich die Blochgleichungen als klassische Kreisgleichung umschreiben:

$$\dot{\Omega} = \begin{pmatrix} \omega_R \\ 0 \\ \delta \end{pmatrix}$$

$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{R} \times \Omega$$

\mathbf{R} entspricht einer Kreisgleichung (Berry Phase unterscheidet dies vom klassischen Kreisel). Es zeigt sich also, dass die Blochgleichungen analog zur Kreisgleichung der Bewegung sind.

Bemerkung: 1.) Im Vektor Ω ist ω_R die Frequenz des treibenden Feldes

2.) Die Bewegungsgleichungen des Blochvektors gehorchen einem Kreuzprodukt

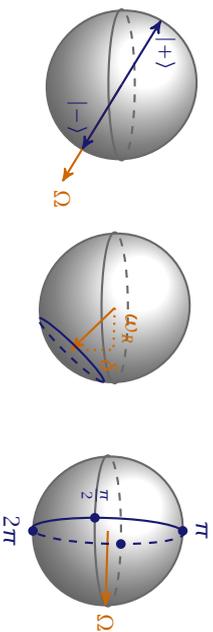
$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{R} \times \Omega$$

Der Vergleich mit der klassischen Mechanik liegt in der Kreisgleichungen

$$\dot{\mathbf{l}} = \Omega \times \mathbf{l}. \tag{2.30}$$

3.) \mathbf{R} und $\dot{\mathbf{R}}$ sind senkrecht aufeinander, d.h. $|\mathbf{R}|^2 = \text{const.} = 1$. Somit können auf der Einheitskugel, bzw. Blochsphäre alle Zustände erreicht werden. Siehe hierzu Abbildung 31

4.) Das Dipolmoment ist maximal am Äquator der Blochkugel und verschwindet an den Polen, d.h. Sättigung.



Eigenzustände

$$\dot{\mathbf{R}} = 0, \text{ d. h. } \mathbf{R} \parallel \Omega.$$

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_R \\ 0 \\ \delta \end{pmatrix}.$$

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_R \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

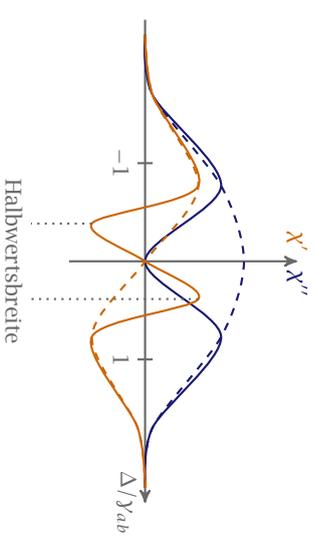
► 31 Dargestellt ist der Vektor Ω auf der Blochkugel bei Verstimmung, Resonanz und die Eigenzustände parallel zu Ω

Fassen wir u , v und w als Erwartungswerte von S_x , S_y und S_z auf, also

$$u = \langle S_x \rangle$$

$$v = \langle S_y \rangle$$

$$w = \langle S_z \rangle$$



► 70 Absorption χ' und Dispersion χ'' über Δ/γ_{ab} aufgetragen. Im Vergleich dazu gestrichelt das 2-Niveau Atom.

im folgenden wollen wir Gleichung (2.66) und (2.67) näher diskutieren, wobei wir Abbildung 70 begutachten. Dort sind Absorption und Dispersion eingezeichnet. Für $\Delta = 0$ gilt

$$\chi'' \propto \gamma_{cb} \quad , \quad \chi' \approx 0$$

Hierbei ist die Breite des Transparenzfenster proportional $\propto \frac{\Omega_c^2}{\gamma_{ab}}$. Für die Transmissionfunktion gilt

$$T(\nu_p, z) = e^{ik_z z} = e^{ik_z(\chi' + i\chi'')}$$

D.h. das Transmissionsfenster wird mit zunehmender optischer Dichte $n\sigma z$ immer schmaler

$$\Delta\nu = \frac{\Omega_c^2}{\gamma_{ab}} \frac{1}{\sqrt{n\sigma z}}$$

für optische Dichte $n\sigma z \gg 1$. Für die Dispersion ist die Halbwertsbreite noch schmaler

$$\Delta\nu_{\text{Disp}} = \frac{\omega_c^2}{\gamma_{ab}} \frac{1}{n\sigma z},$$

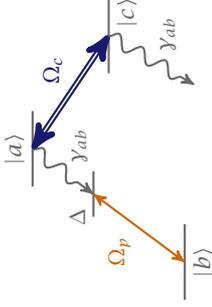
d.h. extreme Dispersion und hohen Transparenz.

Bemerkung: Der Faktor γ_{cb} wird als Dephasierungsrate bezeichnet.

2.5 Pulspropagation

Es zeigt sich, dass die Breite des Absorptionsspeaks in einer dichten Zelle immer schmaler wird. Um die Pulspropagation näher zu untersuchen, führen wir die Größe δ ein, die durch

$$\delta = \omega_p - \omega_0$$



- 69 Drei-Niveau Atom mit Kopplungslaser Ω_c , Probekaser Ω_p und Verstimmung Δ . γ_{ab} beschreibt hierbei spontane Emission in den Zustand $|b\rangle$ und γ_{cb} in einen anderen Zustand.

und für die Dichtematrix gilt

$$\dot{\hat{\rho}} = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{aa} & \mathcal{L}_{ab} & \mathcal{L}_{ac} \\ \mathcal{L}_{ba} & \mathcal{L}_{bb} & \mathcal{L}_{bc} \\ \mathcal{L}_{ca} & \mathcal{L}_{cb} & \mathcal{L}_{cc} \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

Interessant ist jedoch nur die Kohärenz auf \mathcal{L}_{ab} .

Bemerkung: Bedienen wir uns zunächst der Näherung für ein schwaches Probelicht, d.h.

$$\Omega_p \ll \Gamma, \Omega_c$$

und resonanter Kopplungslaser, d.h.

$$\Delta_{ac} = 0.$$

Unter diesen Näherungen erhalten wir

$$\mathcal{L}_{ab} = \frac{i\Omega_p e^{i\omega_p t} (\gamma_{cb} + i\Delta)}{2[(\gamma_{ab} + i\Delta)(\gamma_{cb} + i\Delta) + \Omega_c^2/4]}.$$

hierbei ist Ω die Rabi-Frequenz und ω die Frequenz des elektrischen Feldes.

Schreiben wir also die Polarisation etwas um, indem wir $\chi = \chi' + i\chi''$ einsetzen

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} = n \mathcal{L}_{ab} \mathcal{Q}_{ab}.$$

Hierbei gilt

$$\chi' = \frac{n |d_{ab}|^2 \Delta}{\epsilon_0 \hbar Z} \left[\gamma_{cb} (\gamma_{ab} + \gamma_{cb}) + \left(\Delta^2 - \gamma_{cb} \gamma_{ab} - \frac{\Omega_c^2}{4} \right) \right] \quad (2.66)$$

$$\chi'' = \frac{n |d_{ab}|^2}{\epsilon_0 \hbar Z} \left[\Delta^2 (\gamma_{ab} + \gamma_{cb}) - \gamma_{cb} \left(\Delta^2 - \gamma_{cb} \gamma_{ab} - \frac{\Omega_c^2}{4} \right) \right] \quad (2.67)$$

$$Z = \left(\Delta^2 - \gamma_{ab} \gamma_{cb} - \frac{\Omega_c^2}{4} \right)^2 + \Delta^2 (\gamma_{ab} + \gamma_{cb})^2. \quad (2.68)$$

so repräsentiert dies ein Spin 1/2 System. Die Dynamik ist analog zur Spindynamik in einem fiktiven Magnetfeld Ω

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_R \\ 0 \\ \delta \end{pmatrix}.$$

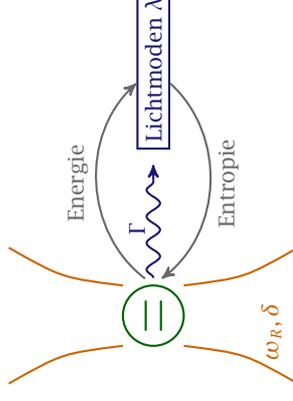
Die Präzessionsfrequenz ist der Betrag des Vektors, also

$$|\Omega| = \sqrt{\omega_R^2 + \Delta^2},$$

dies entspricht gerade der verallgemeinerten Rabi-Frequenz.

2.1.3 Spontane Emission und optische Blochgleichungen

Im Folgenden betrachten wir ein Zwei-Niveau-Atom im Strahlungsfeld mit der Frequenz ω_R und Verstimmung δ . Siehe hierzu Abbildung 32. Dabei bezeichnet $\hat{\rho}$ die Dichtematrix des



► 32 Zwei-Niveau-Atom im Strahlungsfeld

Gesamtsystem aller Lichtmoden λ . Der reduzierte Dichteoperator $\hat{\sigma}$ für das zu betrachtende Zwei-Niveau-Atom ist in diesem Zusammenhang durch

$$\hat{\sigma} = \text{tr}_\lambda(\hat{\rho}) \quad (2.31)$$

gegeben. Diese Spur wird aber nur über alle λ gebildet, d.h. das Ergebnis ist eine 2×2 Matrix, sprich $\hat{\sigma}$ ist eine 2×2 Matrix.

Klassischer Grenzfall

Wir greifen die Überlegungen des Lorentz-Modells nochmals auf, das besagt, dass ein Elektron an einem Atom durch die Differentialgleichung eines harmonisch getriebenen, gedämpften Oszillators beschrieben werden kann, also

$$\ddot{x} + \beta \dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{F(t)}{m} \cos(\omega t). \quad (2.32)$$

$F(t)$ sei hierbei eine langsame, veränderliche Einhüllende. Wir suchen Lösungen der Form

$$x = u \cos(\omega t) - v \sin(\omega t). \tag{2.33}$$

Ansatz (2.33) in (2.32) und sortieren der auftretenden Terme liefert zwei Gleichungen für u und v :

$$\begin{aligned} \dot{u} &= (\omega - \omega_0)v - \frac{\beta}{2}u \\ \dot{v} &= (\omega - \omega_0)u - \frac{\beta}{2}v - \frac{F(t)}{2m\omega} \end{aligned}$$

Hierbei wurde verwendet, dass $\dot{v} \ll \omega v$ und $\dot{u} \ll \omega^2 v$, aufgrund der langsam, veränderlichen Einhüllenden. Für $\dot{u} = \dot{v} = 0$ gilt für $\omega = \omega_0$:

$$\omega^2 - \omega_0^2 = (\omega + \omega_0)(\omega - \omega_0) \approx 2\omega(\omega - \omega_0).$$

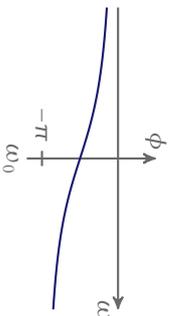
Damit folgt

$$\begin{aligned} u &= -\frac{\delta}{\delta^2 + (\beta/2)^2} \frac{F}{2m\omega} \\ v &= -\frac{\beta/2}{\delta^2 + (\beta/2)^2} \frac{F}{2m\omega} \end{aligned}$$

wobei $\delta = \omega - \omega_0$ ist. Die Phase zwischen $x(t)$ und $F(t)$ ist

$$\phi = \arctan\left(\frac{v}{u}\right).$$

In Abbildung 33 ist der Verlauf der Phase zu sehen. Betrachten wir nun die Energiebilanz.



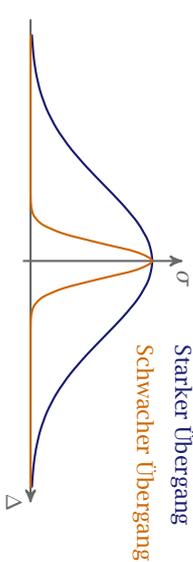
► 33 Phase zwischen $x(t)$ und $F(t)$

Für die Gesamtenergie gilt:

$$E_{\text{ges}} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \triangleq \frac{1}{2} m \omega (u^2 + v^2)$$

Für die zeitliche Ableitung gilt

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\text{ges}} &= m\omega^2 (u\dot{u} + v\dot{v}) \\ &= -\beta E - Fv \frac{\omega}{2}. \end{aligned}$$



► 68 Wirkungsquerschnitt σ über das Detuning Δ aufgetragen. Zu sehen sind starke und schwache Übergänge.

Bemerkung: Wie in Abbildung 68 zu sehen, zeigt sich, dass die Absorptionsfläche, bzw. der Wirkungsquerschnitt nur von der Wellenlänge abhängt. Starke- und schwache-Übergänge unterscheiden sich um die Fläche unter der Kurve, nicht jedoch um deren Peakhöhe. D.h. die Übergänge haben den selben Wirkungsquerschnitt.

Die Intensität ist somit

$$I(\omega, z) \propto I_0 e^{-\mu_0(\omega)z}.$$

Bis jetzt haben wir nur die Absorption betrachtet. Da jedoch auch die Dispersion wichtig ist, betrachten wir die **Suszeptibilität**, die die Beziehung zwischen Polarisation und elektrischen Feld darstellt. Erwünscht wäre

$$e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}}.$$

Bemerkung: Nun stellt sich die Frage nach der Suszeptibilität

$$\chi = \chi' + i\chi''$$

eines Mediums, im Falle von 3-Niveau Atomen?

Betrachten wir zunächst die Polarisation \mathbf{P}

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} = n \mathbf{d} e_{ab}.$$

n bezieht sich hier auf die Anzahldichte und e_{ab} beschreibt die Population im Überlagerungszustand $|a\rangle$ und $|b\rangle$ (Abb. 69). Dargestellt ist ein Drei-Niveau System mit Koppelaser und Probelaser. D.h. wir suchen die **Blochgleichungen eines 3-Niveau Atom**. e_{ab} erhalten wir aus der Gleichgewichtslösung der Bewegungsgleichungen der Dipolmomente/Dichematrix

$$\dot{\hat{\rho}} = [\hat{\rho}, \hat{H}] - \hat{\Gamma}. \tag{2.63}$$

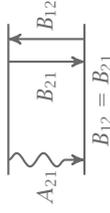
Hierbei hat der Hamiltonoperator \hat{H} unter Beachtung der RWA die Form

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \omega_a & \Omega_p & 0 \\ \Omega_p & \omega_b & \Omega_c \\ 0 & \Omega_c & \omega_c \end{pmatrix}, \tag{2.64}$$

Es gilt jedoch zu beachten, dass bei der Herleitung keine Sättigungseffekte berücksichtigt wurden, da $n = n_g = n_e$ (Grundzustandsbesetzung). Die Eigentliche Differentialgleichung ist

$$\frac{dI}{dz} = -(n_g - n_e)\sigma(\omega)I$$

Hierbei beschreibt der Faktor $(n_g - n_e)$ mit n_g die stimulierte Absorption und n_e die stimulierte Emission. Diese sind über die Einsteinkoeffizienten bestimmt, siehe hierzu Abbildung 67. Somit folgt weiter



► 67 Stimulierte Emission und Absorption, sowie spontane Emission in einem Zwei-Niveau-System. A_{21} , B_{21} , B_{12} sind hierbei die Einsteinkoeffizienten der spontanen Emission, stimulierten Emission und Absorption.

$$(n_g - n_e)\sigma(\omega)I = n_e A_{21} \hbar \omega.$$

Die spontane Emission übernimmt die Rolle der Störung. Erinnern wir uns an die Blochgleichungen, so lässt sich $\sigma(\omega)$ wie folgt umschreiben.

$$\Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{A_{21} \hbar \omega}{I} \frac{n_e}{n_g - n_e} = \frac{A_{21} \hbar \omega}{I} \frac{\rho_{ee}}{w}. \quad (2.59)$$

Erinnern wir uns an das Zwei-Niveau System, so ergibt sich mit $n_e = \rho_{ee}$ und $n_g - n_e = w$

$$\sigma(\omega) = \frac{A_{21} \hbar \omega}{I} \frac{\Omega^2 / 4}{\Delta^2 - \Gamma^2 / 4}. \quad (2.60)$$

Mit $I = \epsilon_0 c |E|^2$ und $\Omega^2 = (\langle d \rangle E)^2$ erhalten wir

$$\sigma(\omega) = 3 \frac{\pi^2 c^2}{\omega_0^2} A_{21} \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{\Delta^2 + \Gamma^2 / 4}. \quad (2.61)$$

Der Faktor 3 ist hierbei abhängig von der Polarisation und Orientierung (für ein ideales zwei-Niveau Atom ist er gleich 3).

Bemerkung: Für $\omega = \omega_0$, also der Resonanzfrequenz erhalten wir für Gleichung 2.61

$$\sigma(\omega = \omega_0) = \frac{2\pi^2 c^2 \lambda^2}{4\pi^2} \frac{4}{2\pi} \quad (2.62)$$

Definieren wir nun $\tilde{\lambda} := \lambda / 2\pi$ so erhalten wir

$$\sigma(\omega_0) = 6\pi \tilde{\lambda}. \quad \rightarrow$$

Es zeigen sich also die folgenden Proportionalitäten:

$$E \propto x^2 \propto e^{-\beta t}$$

$$x = x_0 e^{-\beta t / 2} \cos(\omega t + \phi)$$

Quantenmechanisch lässt sich die Van-Neumann-Gleichung modifizieren, indem wir dem angeregten Zustand eine Zerfallsrate Γ zuordnen. Die Van-Neumann-Gleichung lautet dann

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] + \frac{\Gamma}{2} (\mathbb{1} + \sigma_z). \quad (2.34)$$

Wobei der Hamiltonoperator aus (2.25) zu verwenden ist. Die Lösungen dieser inhomogenen Differentialgleichung ergeben die *Blochgleichungen im gedämpften Fall* mit spontaner Emission:

$$\dot{u} = \delta - \frac{\Gamma}{2} u \quad (2.35)$$

$$\dot{v} = -\delta u + \omega_R w - \frac{\Gamma}{2} v \quad (2.36)$$

$$\dot{w} = -\omega_R v - \Gamma(w - 1) \quad (2.37)$$

Dies sind die *optischen Blochgleichungen*. Die optischen Blochgleichungen beschreiben ein Ensemble von Atomen, die gleichzeitig beobachtet werden.

Im Gleichgewichtszustand gilt für die Blochgleichungen

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \\ \dot{w} \end{pmatrix} = 0.$$

Dies führt zu folgendem Blochvektor

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \frac{1}{\delta^2 + \frac{\omega_R^2}{2} + \frac{\Gamma^2}{4}} \begin{pmatrix} \omega_R \delta \\ \Gamma \\ \delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4} \end{pmatrix}.$$

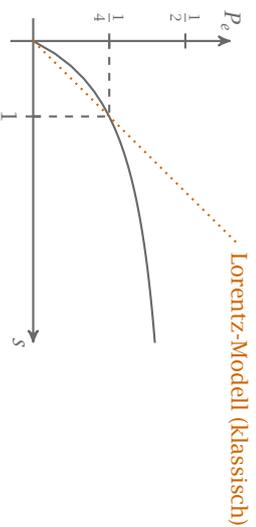
Die Darstellung lässt sich durch Einführen einer dimensionslosen Zahl, dem *Sättigungsparameter*

$$S := \frac{\omega_R^2 / 2}{\delta^2 + \Gamma^2 / 4} \quad (2.38)$$

verschönern. Für das Matrixelement ρ_{22} der Dichtematrix bedeutet dies

$$\begin{aligned} \rho_{22} &= P_e \\ &= \frac{1-w}{2} \\ &= \frac{\omega_R^2 / 4}{\delta^2 + \omega_R^2 / 2 + \Gamma^2 / 4} \\ &= \frac{1}{2} \frac{S}{S+1}. \end{aligned}$$

Fit $S \ll 1$, so ist man im linearen Bereich, wie vom Lorentzmodell bestätigt. Erst für größere S tritt Abweichung zum Lorentzmodell auf. Abbildung 34 zeigt dieses Verhalten. Für große S konvergiert e_{22} gegen die Wahrscheinlichkeit $1/2$.



► 34 Wahrscheinlichkeit in $|e\rangle$ zu sein in Abhängigkeit des Sättigungsparameter versus dem Lorentzmodell

2.2 Lichtkräfte und Laserkühlung

Theorem Das Ehrenfest-Theorem lautet

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = -i\hbar \langle [H, A] \rangle + \langle \partial_t A \rangle.$$

A ist hierbei ein quantenmechanischer Operator (physikalische Größe) der im Allgemeinen zeitabhängig ist und H der Hamiltonoperator des Systems. ✕

Bemerkung: Das Ehrenfestische Theorem besagt, dass sich quantenmechanische Observablen im Mittel klassisch Verhalten. Außerdem gilt:

- Verschwindet der Kommutator $[A, H] = 0$ und ist zudem $\partial_t A = 0$ bleibt der Erwartungswert erhalten. Es folgt dann:

$$\frac{d}{dt} \text{prob}[A \triangleq a_n | \psi(t)] = 0.$$

- Ein klassisches Analogon stellt hierbei die Poisson Klammer dar

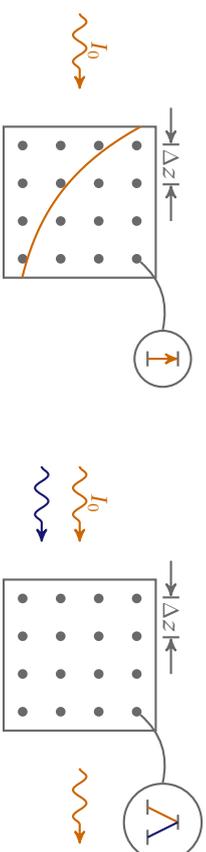
$$\frac{d}{dt} f(q_i, p_i, t) = \{f, H\} + \partial_t f.$$

Das Ehrenfest-Theorem erlaubt eine klassische Näherung, indem wir den Eigenwert der Kraft $F(x)$ in einer Taylorreihe entwickeln um den Erwartungswert $\langle x \rangle$, d.h.

$$\begin{aligned} \langle F(x) \rangle &= \left\langle F(\langle x \rangle) + F'(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle) + \frac{1}{2} F''(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle)^2 + \mathcal{O}(x^3) \right\rangle \\ &= F(\langle x \rangle) + F'(\langle x \rangle) \underbrace{\langle (x - \langle x \rangle) \rangle}_{=0} + \frac{1}{2} F''(\langle x \rangle) \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle + \langle \mathcal{O}(x^3) \rangle \\ &= F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} F''(\langle x \rangle) (\Delta x)^2 + \langle \mathcal{O}(x^3) \rangle \end{aligned}$$

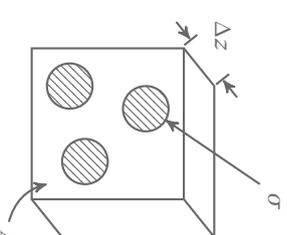
2.4 Elektromagnetisch induzierte Transparenz (EIT) optischer Medien

Wir betrachten Boxen mit Zwei- und Drei-Niveau-Atomen die mit einem Laserstrahl bestrahlt werden, vgl. Abbildung 65. Wir sind am Absorptionsverhalten des Medium interessiert. Durch



► 65 Box mit Zwei-Niveau Atomen und eingezeichneten Absorptionsgesetz nach Beer (links) und eine Box mit Drei-Niveau Atomen. Bei Drei-Niveau Atomen wird ein Kontrolllaser zusätzlich mit eingestrahlt.

die Atomzahl N und das Volumen V ist eine Dichte gegeben. Im Folgenden wollen wir das Absorptionsgesetz herleiten. Dazu betrachten wir eine dünne Schicht der Breite Δz der Boxen (vgl. hierzu Abbildung 66). In der Schichtdicke Δz sind



► 66 Box mit Fläche A und Dicke Δz . Die Flächen σ stellen der Streuquerschnitt da.

$$\frac{1}{A} \cdot n \cdot \Delta z \cdot \sigma$$

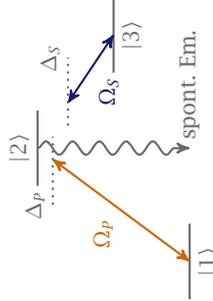
Atome. D.h. es handelt sich um den Bruchteil der durch den Absorber besetzten Fläche. Somit folgt

$$\begin{aligned} \Delta I &= -\Delta z \sigma I \\ \frac{\Delta I}{\Delta z} &= -n \sigma I \\ \Rightarrow I &= I_0 e^{-n \sigma z}, \end{aligned} \tag{2.58}$$

wobei σ abhängig von ω ist (Inverse Länge). Hierbei handelt es um das **Beersche Absorptionsgesetz**.

STRAP (Stimulated raman adiabatic passage)

Im Experiment **STRAP** (Stimulated raman adiabatic passage) verwendet man ein Drei-Niveau System wie in Abbildung 64. Ziel ist es alle Atome von Niveau $|1\rangle$ in Niveau $|3\rangle$ zu bringen. Dies geschieht dadurch, dass der Laser P aufgedreht wird, während der Laser S langsam abgeschaltet wird. Der Hamiltonoperator des Systems ist hierbei durch



▶ 64 STRAP Drei Niveau System

$$H(t) = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_P(t) & 0 \\ \Omega_P(t) & 2\Delta_P & \Omega_S(t) \\ 0 & \Omega_S(t) & 2(\Delta_P - \Delta_S) \end{pmatrix}$$

gegeben. Dabei werden die folgenden Zustände durchlaufen

$$\begin{aligned} |a^+\rangle &= \sin\theta \sin\phi |1\rangle + \cos\phi |2\rangle + \cos\theta \sin\phi |3\rangle \\ |a^0\rangle &= \cos\theta |1\rangle - \sin\theta |3\rangle \\ |a^-\rangle &= \sin\theta \cos\phi |1\rangle - \sin\phi |2\rangle + \cos\theta \cos\phi |3\rangle. \end{aligned} \tag{2-55}$$

Hierbei entspricht θ einem Mischungswinkel der durch die Definition

$$\tan\theta = \frac{\Omega_P(t)}{\Omega_S(t)} \tag{2-56}$$

gegeben ist. Der Winkel ϕ steht im Zusammenhang mit der Rabi-Frequenz und dem Detuning. Er spielt jedoch keine Rolle für die folgende Diskussion, sodass keine explizite Darstellung des Winkels erfolgt. Die Eigenwerte der Zustände (2.55) lauten

$$\omega_{\pm} = \Delta_P \pm \sqrt{\Delta_P^2 + \Omega_P^2 + \Omega_S^2} \quad \omega^0 = 0. \tag{2-57}$$

Die Eigenzustände $|a^{\pm}\rangle$ beinhalten den Zustandsvektor $|2\rangle$, für den kein Populationszuwachs erfolgen soll. Der Zustand $|a^0\rangle$ enthält die beiden Zustände $|1\rangle$ und $|3\rangle$ für die ein Populationstausch statt finden soll, sodass wir diesen Eigenzustand untersuchen. Der Hilbertraumwinkel θ lässt sich experimentell kontrollieren, sodass $|a^0\rangle$ so präpariert werden kann, dass er Anfangs dem Zustand $|1\rangle$ entspricht ($\theta(0) = 0$) und nach einer Zeit t dem Zustand $|3\rangle$ ($\theta(t) = \pi/2$). Findet die Änderung des Winkels θ im Hilbertraum adiabatisch statt, d.h.

$$|\langle a^{\pm} | \dot{a}^0 \rangle| \ll 1,$$

so lässt sich ein Populationstransfer von $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ durch die Variation von Ω_P respektive Ω_S erreichen, ohne dass der Zwischenzustand $|2\rangle$ involviert ist.

x

Wird nur der erste Summand betrachtet (nur erlaubt, falls die Kraft eine lineare Funktion ist), also

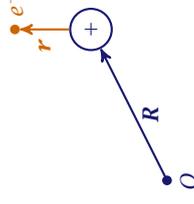
$$\langle F(x) \rangle \approx F(\langle x \rangle),$$

so erhält man eine Differentialgleichung der Form

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(\langle x \rangle).$$

Die Erwartungswerte bewegen sich also auf klassische Bahnen, d.h. das Ehrenfest-Theorem liefert uns direkt die Newtonsche Bewegungsgleichung, wenn wir nach dem Korrespondenzprinzip die Operatoren durch klassische Größen ersetzen.

2.2.1 Dipolkraft und spontane Lichtkraft



▶ 35 Zur Berechnung der gemittelten Kraft und der Näherung

Zunächst berechnen wir die gemittelte Kraft mit Hilfe der obigen Bemerkung

$$m_{\text{Atom}} \langle \ddot{R} \rangle = \langle \nabla_R(\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}) \rangle.$$

Der Nabla-Operator wirkt hierbei nur auf \mathbf{R} , da $\lambda \gg \mathbf{d}$, bzw. \mathbf{r} nur wenig Angström beträgt (Vgl. Abbildung 35). Insbesondere gilt

$$m_{\text{Atom}} \langle \ddot{R} \rangle = \sum_{j=x,y,z} \langle d_j \rangle \cdot \nabla E_j.$$

Im Folgenden berücksichtigen wir die Näherung, dass mit punktförmigen Teilchen gerechnet werden kann, also

$$\langle \ddot{R} \rangle = \ddot{R},$$

da die DeBroglie-Wellenlänge viel kleiner ist als die des Feldes (optisch), also

$$\lambda_{\text{dB}} \ll \lambda_{\text{optisch}}.$$

Jetzt betrachten wir ein »ruhend« Atom, d.h. wir bekommen die Gleichgewichtslösungen für $\langle d_j \rangle$.

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{d}} \rangle &= \text{tr} [\rho \cdot \hat{\mathbf{d}}] \\ &= \mathbf{d}_{12} (\rho_{12} + \rho_{21}) \\ &= 2\mathbf{d}_{12} (u_{st} \cos \omega_L t - v_{st} \sin \omega_L t) \end{aligned}$$

Bemerkung: Nur die Außerdiagonalelemente geben ein Dipolmoment, d.h. liefern einen Beitrag.

Die Bestimmung von u_{st} , bzw. v_{st} soll anhand verschiedener Überlegungen erfolgen. So betrachten wir folgendes elektrisches Feld

$$\mathbf{E} = \epsilon \mathbf{E}_0(\mathbf{R}) \cos(\omega_L t + \phi(\mathbf{R})).$$

Gradient auf eine der Komponenten von \mathbf{E} ergibt

$$\nabla E_j = e_j \cos(\omega_L t + \phi) \cdot \nabla E_0 - e_j E_0 \sin(\omega_L t + \phi) \cdot \nabla \phi.$$

Die **Lichtkraft** ist somit:

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \sum_j \langle d_j \rangle \nabla E_j & (2.39) \\ &= \epsilon \cdot \mathbf{d}_{12} [u_{st} \nabla E_0 + v_{st} E_0 \nabla \phi] & (2.40) \end{aligned}$$

Hierbei ist der Term $u_{st} \nabla E_0$ die in Phase **Dipolkraft** und $v_{st} E_0 \nabla \phi$ die spontane Lichtkraft (hier auch als Lichtdruck bezeichnet). Im Zuge der Rechnung wurde beachtet, dass in zeitlichen Mittel über eine optische Periode sowohl Sinus als auch Kosinus verschwinden. Die Klammer kann wie folgt umgeschrieben werden

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{Dipol}} &= -\frac{\hbar \omega_R u_{st}}{\omega_R} (\nabla \omega_R) \\ \mathbf{F}_{\text{spont}} &= \hbar \omega_R v_{st} (\nabla \phi). \end{aligned}$$

► **Beispiel** Für eine laufende Welle mit $\mathbf{E} = \epsilon \mathbf{E}_0 \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r})$ folgt:

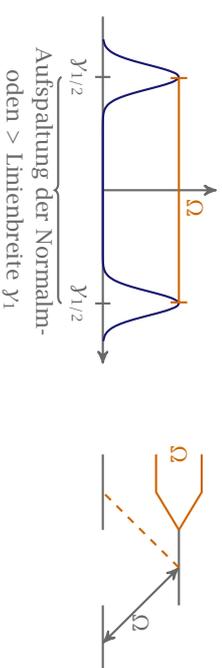
$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{R}) &= -\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r} \\ \Rightarrow \nabla \phi &= -\mathbf{k}_L \end{aligned}$$

Die spontane Lichtkraft ist somit

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{spont}} &= \omega_R v_{st} \hbar \mathbf{k}_L \\ &= \frac{\Gamma}{2S + 1} \hbar \mathbf{k}_L \end{aligned}$$

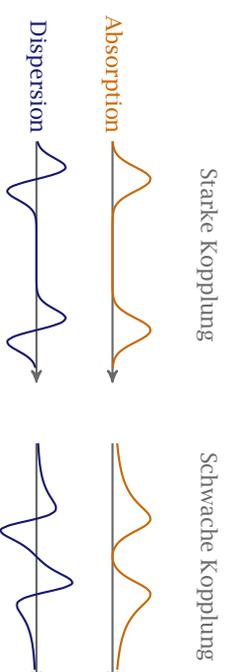
Es zeigt sich, dass die spontane Lichtkraft bei $\frac{\Gamma}{2} \hbar \mathbf{k}_L$ sättigt.

3.) Im Fall der starken Kopplung, also $\Omega \gg \gamma_1$ erhalten wir die Absorptionsspeaks der starken Kopplung in Abbildung 61. Man spricht auch von der **Autler-Townes Aufspaltung**. Hierbei ist die Aufspaltung der Normalmoden weitaus größer als die Linienbreite γ_2



► 61 Absorptionsspeaks der starken Kopplung und Autler-Townes Aufspaltung

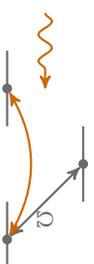
4.) Für die Dispersion erhalten wir die verschiedenen Fälle wie sie in Abbildung 62 dargestellt sind. Im Fall der starken Kopplung erhalten wir hohe Transmission und hohe



► 62 Absorptions- und Dispersionskurve der starken und schwachen Kopplung.

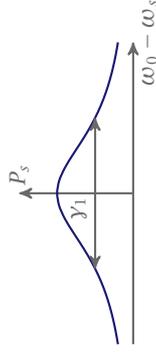
normale Dispersion, dies entspricht einer langsamen Gruppengeschwindigkeit.

Bemerkung: Nun stellt sich die Frage, wo das Licht hingegangen ist, dazu betrachten wir Abbildung 63. D.h. es bildet sich ein Überlagerungszustand der beiden Grundzustände. Der Probelaser »schreibt« sozusagen in das Drei-Niveau-Atom hinein. Das

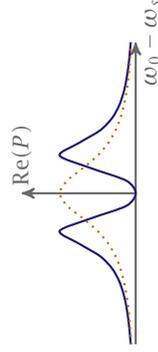


► 63 Zur Veranschaulichung des Prozesses

Ausschalten des Lasers führt zu einem Überlagerungszustand. Einschalten des rechten Lasers führt dann zu einer Beugung am Überlagerungsmuster. Damit kommt selbes Licht wieder hinaus, wie jenes, das vom Probelaser hinein kam (und zwar Phasengleich).



► 58 Realteil von Gleichung (2.54) mit eingezeichneter Linienbreite γ_1 . (Absorptionskurve)



► 59 Realteil der absorbierten Leistung im Fall der schwachen Kopplung. Die Maxima der Funktion liegen dabei höher als für ein Lorentzpeak eines 2 Niveaus-Systems. Zusätzlich erkennt man die Einschnürung bei 0. (Absorptionskurve)

Bemerkung: Die Resonanzfrequenz (Punkt der Einschnürung) für die destruktive Interferenz ist zwischen ω_0 und ω_S

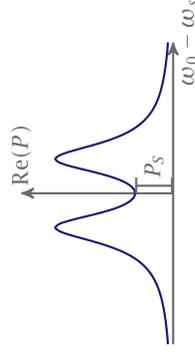
$$\omega_S^2 = \frac{K_1 + K}{2},$$

d.h. eine Normalmode wird oberhalb und eine unterhalb der Resonanzfrequenz getrieben. Die Antwort ist somit einmal in Phase und einem außer Phase. Die Gesamtauslenkung ist demnach Null!

- Für $\gamma_2 = 0$ und $\omega_S = \sqrt{(K_1 + K)}/m$ verschwindet P_S , also $P_S = 0$.
- Für $\gamma_2 \neq 0$ und $\omega_S = \sqrt{(K_1 + K)}/m$ gilt für P_S

$$P_S(\omega_S) = \frac{2\pi F \omega_S^2 \gamma_2}{m[\gamma_1 \gamma_2 \omega_S^2 + \Omega^4]} \neq 0$$

so wird das elektromagnetische induzierte Transparenzsignal, wie in Abbildung 59 zu sehen, nicht auf Null abfallen.



► 60 Realteil der Leistung für den Fall $\gamma \neq 0$ und einer Frequenz $\omega_S = \sqrt{(K_1 + K)}/\sqrt{m}$

► Eine stehende Welle (mithilfe zwei laufender Wellen)

$$E = \epsilon E \cos(k_L z) \cos(\omega_L t)$$

Berechnung der Dipolkraft

$$\begin{aligned} \vec{F}_{\text{Dipol}}^f &= -\hbar \delta \frac{S}{S+1} \frac{1}{\omega_R} \nabla \omega_R \\ &= \delta \frac{S}{S+1} \hbar k_L \tan(k_L z) \end{aligned}$$

Bemerkung: 1.) Für $\delta = 0$ ist die zeitlich gemittelte Dipolkraft

$$\vec{F}_{\text{Dipol}}^f = 0,$$

aber große Fluktuationen.

2.) \vec{F}_{Dipol}^f ist nicht wie die zeitlich gemittelte spontane Lichtkraft \vec{F}_{spont}^f nach oben begrenzt. Für jedes ω_R gibt es ein δ , dass die gemittelte Dipolkraft \vec{F}_{Dipol}^f maximiert. Typischer Wert ($\omega_R \gg \Gamma$) zeigt

$$\delta \propto \omega_R,$$

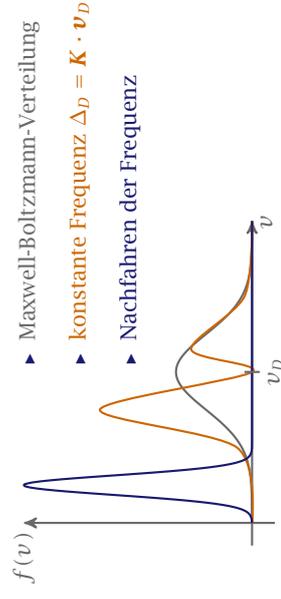
und somit

$$\vec{F}_{\text{Dipol}}^f = \hbar k \omega_R.$$

D.h. stimulierte Absorption-, bzw. Emissionszyklen.

2.2.2 Laserkühlung

2.2.2.1 Abbremsen von Atomen



- Maxwell-Boltzmann-Verteilung
- konstante Frequenz $\Delta_D = \vec{K} \cdot \vec{v}_D$
- Nachfahren der Frequenz

► 36 Der Atomstrahl aus einem Ofen wird durch einen entgegenkommenden Laserstrahl dahingehend beeinflusst, das dessen Atome abgebremst werden. Anschaulich handelt es sich um die Geschwindigkeitsverteilung (Dichte der Atome über der Geschwindigkeit aufgetragen) vor und nach dem kühlen.

Die **Lasertkühlung** und die damit verbundene Geschwindigkeitsverteilung wie in Abbildung 36 kann experimentell durch folgenden Versuch erreicht werden. Atome aus einem Ofen treffen auf eine Blende durch deren Loch sie fokussiert werden. Ein entgegenkommender Laserstrahl eines Lasers nahe der Resonanzfrequenz der Atome verursacht das Abbremsen der Atome. Dies gelingt dadurch, dass die Atome im Atomstrahl vom entgegenkommenden Laserstrahl Lichtquanten absorbieren (Laserlicht muss in dem Fall auf die atomaren Resonanzlinien abgestimmt sein) und dabei einen Photonenimpuls von

$$\Delta p = \hbar k$$

übertragen bekommen. Die Geschwindigkeitskomponente der Atome in Laufrichtung ändert sich dementsprechend um

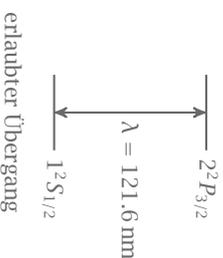
$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m} = \frac{\hbar k}{m}.$$

Das angeregte Atom gibt seine Energie schließlich durch Fluoreszenz wieder ab. Die Atome erfahren dabei einen Rückstoßimpuls. Die Fluoreszenz wird jedoch statistisch über alle Richtungen emittiert, so dass der Impuls im Mittel über die Absorption-Emissionszyklen verschwindet. Nur bei Absorption wird er in eine Richtung übertragen, weshalb sich dieser bei vielen Zyklen aufaddiert. Dies ist ja gerade wünschenswert. Also muss ein Weg gefunden werden um möglichst viele solcher Zyklen zu verursachen. Das Atom muss deshalb bei Emission möglichst wieder in den Grundzustand übergehen und nicht in andere Zustände. Mit anderen Worten, es müssen geeignete Atomübergänge gesucht werden. Für den Fall der Dopplerkühlung ist eine ausführliche theoretische Behandlung im Anhang zu finden.

2.2.2.2 Ausflug in die Atomphysik: Welches Atom kann man kühlen?

Im Folgenden betrachten wir verschiedene Atome um ihre Möglichkeit auf Laserkühlung zu bestimmen:

- 1.) Das Wasserstoffatom weist eine Sättigungsintensität auf von $I_S = 7.2 \frac{W}{cm^2}$. Vergleiche



► 37 Atomübergang von Wasserstoff

hierzu Abbildung 37. Es zeigt sich aber, dass es derzeit nicht möglich ist Laserkühlung bei Wasserstoff anzuwenden, da es keine Laser der Intensität $\lambda = 121.6 \text{ nm}$ gibt.



► 57 Klassisches Analogon des Drei-Niveau-System. Hierbei wird Masse m_1 getrieben. Im Drei-Niveau-System sind vor allem die Absorptions- und Dispersions-eigenschaften des Probelasers (ein schwacher Laser) interessant. Diesem wird ein Laser, der für die Kopplung der beiden Niveaus zuständig ist, entgegen gerichtet.

Das klassische Modell kann mittels einem Differentialgleichungssystems beschreiben werden, dieses lautet

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 + \gamma_1 \dot{x}_1 + \omega_0^2 x_1 - \Omega^2 (x_2 - x_1) &= 0 \\ \dot{x}_2 + \gamma_2 \dot{x}_2 + \omega_0^2 x_2 - \Omega^2 (x_1 - x_2) &= 0. \end{aligned} \tag{2.50}$$

Hierbei ist $\Omega^2 = K/m$. Das DGL-System lässt sich mit den Ansätzen

$$\begin{aligned} x_1(t) &= N_1 e^{-i\omega_s t} \\ x_2(t) &= N_2 e^{-i\omega_s t} \end{aligned}$$

lösen. N_i sind hierbei komplexe Konstanten, also $N_i \in \mathbb{C}$. Als Lösung ergibt sich

$$x_1(t) = \frac{m[(\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_1 \omega_s)(\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_2 \omega_s)] F e^{-i\omega_s t}}{m[(\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_1 \omega_s)(\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_2 \omega_s) - \Omega^4]} \tag{2.52}$$

Aus Gleichung (2.52) ergibt sich für die absorbierte Leistung $P(t)$ gemittelt über eine Periode

$$\overline{P(t)} = \overline{F \cdot \dot{x}_1(t)}.$$

D.h. wir erhalten

$$P_S = \frac{2\pi i F^2 \omega_s (\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_2 \omega_s)}{m[(\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_1 \omega_s)(\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_2 \omega_s) - \Omega^4]} \tag{2.53}$$

Im folgenden wollen wir nun Gleichung (2.53) diskutieren

- 1.) Im ungekoppelten Fall, also $\Omega = 0$ gilt

$$P_S(\omega_s) = \frac{2\pi i F^2 \omega_s}{m[\omega_0^2 - \omega_s^2 - i\gamma_1 \omega_s]} \tag{2.54}$$

Abbildung 58 zeigt den Realteil der Funktion. Dabei beschreibt γ_1 in (2.54) die Linienbreite.

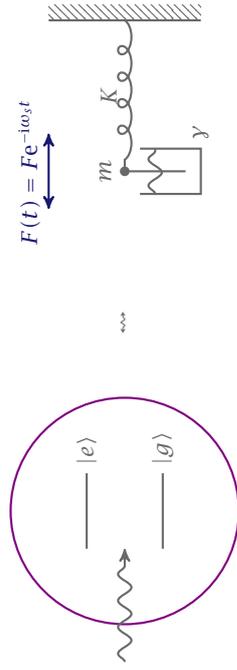
- 2.) Im Fall der schwachen Kopplung, also $\Omega \ll \gamma_1$ ergibt sich Abbildung 59.

2.3 Drei-Niveau-Atome

2.3.1 Das klassische Modell

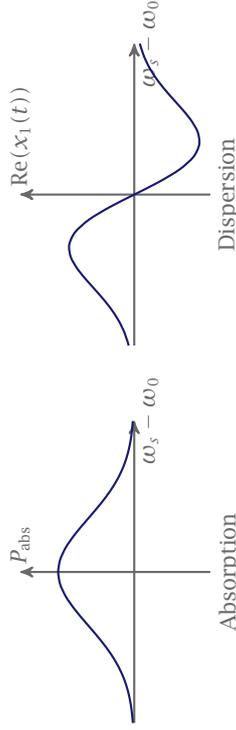
Das klassische Modell eines Drei-Niveau-Atoms erweitert letztendlich das Lorentzmodell des Zwei-Niveau-Atoms um ein weiteres Niveau, d.h. um eine weitere Masse mit Feder.

- ▶ Im klassischen Modell entspricht ein zwei-Niveau-System ohne Sättigung einen gedämpften harmonischen Oszillator (Abbildung 55). Das klassische Modell führt auf



- ▶ 55 Gedämpfter harmonischer Oszillator als klassische Interpretation eines zwei-Niveau-Systems.

die Absorptions- und Dispersionsrelationen die in Abbildung 56 dargestellt sind. Dies entspricht der bekannten Kramers-Kronig-Relation.



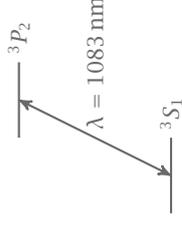
- ▶ 56 Gedämpfter harmonischer Oszillator als klassische Interpretation eines zwei Niveausystems.

- ▶ Ein *Drei-Niveau-Atom* kann im Sinne des Lorentzmodell als gedämpfte, getriebene, gekoppelte Massen wie in Abbildung 57 beschrieben werden. Im klassischen Modell beschreibt γ_2 effektiv ein Zerfall des $|g_2\rangle$ -Niveaus und kann aufgrund des gewählten Systems als kleine Störung betrachtet werden. γ_1 beschreibt demnach den Zerfall des $|e\rangle$ -Niveaus. Zur Vereinfachung seien im folgenden $K_1 = K_2$ und $m_1 = m_2$. Dies entspricht der Entartung zwischen $|g_1\rangle$ und $|g_2\rangle$.

Bemerkung: Wird m_1 mit der richtigen Frequenz getrieben, so ist dessen Amplitude Null, d.h. m_1 bewegt nicht.

- 2.) Das Heliumatom weist eine Sättigungsintensität auf von

$$I_S = 0.17 \text{ mW cm}^{-2}.$$



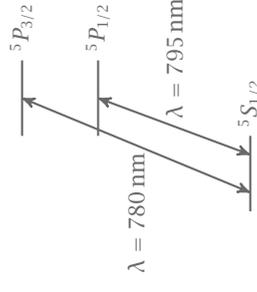
Übergang im Triplettzustand

- ▶ 38 Atomübergang von Helium

Vergleiche hierzu Abbildung 38. Es zeigt sich dass bei einer Lebensdauer von $\tau = 100 \text{ ns}$ in einen Triplett-Übergang es möglich ist Helium zu kühlen. Dies ist bei Argon, Neon, Xenon oder Krypton ähnlich. Metastabile Edelgasatome sind also gute Kandidaten.

- 3.) Bei Alkaliatomen (Li, Na, Rb, K, Cs) zeigt sich, dass ein sogenannter Rückpumper nötig ist, d.h. ein zweiter Laser. Die Sättigungsintensität liegt bei

$$I_S \approx 1.5 \frac{\text{mW}}{\text{cm}^2}.$$



Hyperfeinstruktur Rb

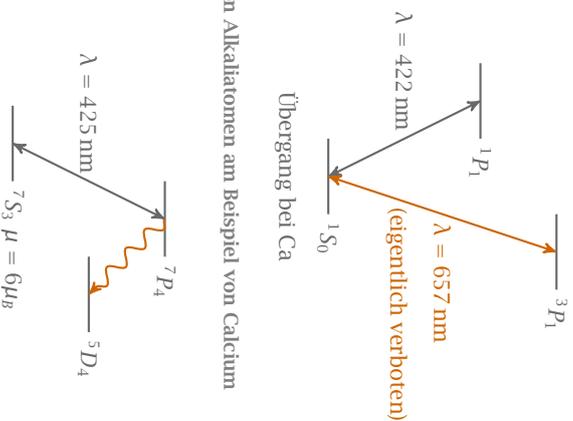
- ▶ 39 Atomübergänge von Alkaliatomen am Beispiel von Rubidium

- 4.) Bei Erdalkalimetallen (Mg, Ca, Sr, Ba, Yb, Dy, Er, Ho) liegt die Linienbreite bei $\Gamma/2\pi = 31 \text{ MHz}$ und die Sättigungsintensität bei (Abbildung 40)

$$I_S = 60 \frac{\text{mW}}{\text{cm}^2}.$$

Es zeigt sich, dass ein eigentlich nach den Auswahlregeln verbotener Übergang eine Laserkühlung ermöglichen würde.

- 5.) Im speziellen wollen wir nun Chrom (Cr) anschauen. Auch hier wird ein eigentlich



► 40 Atomübergänge von Alkaliatomen am Beispiel von Calcium

► 41 Atomübergänge von Chrom

verbotener Übergang verwendet. Das Verzweigungsverhältnis beträgt ca 10^{-5} und die Sättigungsintensität

$$I_S \approx 8 \frac{\text{mW}}{\text{cm}^2}.$$

Siehe insbesondere Abbildung 41.

6.) Sind auch Moleküle Laserkühlbar? Zusätzliche Freiheitsgrade (Rotation, Schwingung) erschweren ein zwei-Niveau-System.

Bemerkung: Die J/J -Kopplung erlaubt auch Übergänge im Falle des Interkombinationsverbots.

2.2.3 Die Dopplerkühlung

Im Folgenden betrachten wir zwei-Niveau-Atome zwischen zwei entgegengesetzt gerichteten Laserstrahlen. Das Atom emittiert hierbei spontan Photonen in alle Raumrichtungen und bewege sich mit einer Geschwindigkeit v nach links, siehe hierzu Abbildung 42. Bei der *Dopplerkühlung* nutzen wir den Dopplereffekt des bewegten Atoms sowie die Verstimmung der Lasers aus. Die Laser haben hierbei ein Geschwindigkeitsprofil wie in Abbildung 43. Die spontane Lichtkraft ist gegeben durch

$$F = \Gamma \hbar k \propto P_e.$$

2. Beobachtung Betrachten wir nun die Wirkung von $|\psi_{nc}(p)\rangle$ auf \hat{H}_a

$$\begin{aligned} \hat{H}_a |\psi_{nc}(p)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{(p - \hbar k)^2}{2m} |g_-, p - \hbar k\rangle + \frac{(p + \hbar k)^2}{2m} |g_+, p + \hbar k\rangle \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{p^2}{2m} |\psi_{nc}(p)\rangle + \frac{(\hbar k)^2}{2m} [|g_-, p - \hbar k\rangle + |g_+, p + \hbar k\rangle] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hbar k p}{2m} [|g_-, p - \hbar k\rangle - |g_+, p + \hbar k\rangle] \right\} \\ &= \left(\frac{p^2}{2m} + \epsilon_{\text{rec}} \right) |\psi_{nc}(p)\rangle - \frac{\hbar k p}{2m} |\psi_c(p)\rangle, \end{aligned}$$

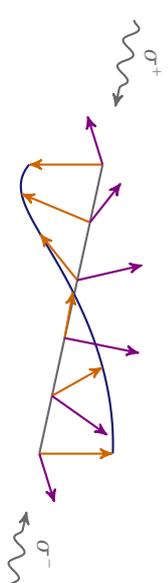
wobei ϵ_{rec} die Recoilenergie ist. D.h. die Bewegung ($p \neq 0$) koppelt an $|\psi_{nc}\rangle$ und $|\psi_c\rangle$ und damit wieder ans Lichtfeld. Nur $p = 0$ bleibt dauerhaft entkoppelt.

Bemerkung: Die Bewegung wandelt den dark state in einen bright state um. Wenn von p gesprochen wird, ist meist der Erwartungswert $\langle p \rangle$ gemeint.

$|\psi_{nc}(p)\rangle$ ist ein stationärer Eigenzustand des gesamten Hamiltonoperators.

Anschauliches Bild

Ist die Grundzustandspolarisation an jedem Ort gerade orthogonal zur Polarisation des Lichtfelds, kann kein Licht absorbiert werden. Vergleiche hierzu Abbildung 54. Der Überläge-



► 54 Entgegen gerichtetes σ_+ und σ_- polarisiertes Licht interferieren in den resultierenden Zustand (Mitte). Veranschaulicht wird die Abhängigkeit der Phase.

rungszustand

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|g_-, p - \hbar k\rangle + |g_+, p + \hbar k\rangle]$$

ist eine stehende Materiewelle mit »Polarisationsgradient« im Grundzustand (oder Matrixelement \hat{d}).

Für $\delta \neq 0$ existiert dennoch ein dark state. $\langle p \rangle = 0$ besagt, dass keine Bewegung im Mittel stattfindet. Die Fluktuation, also $\langle p^2 \rangle$ verschwindet jedoch nicht.

Bemerkung: Vergleiche hierzu das Paper: J. Dalibard und C. Cohen-Tannoudji, „Dressed-atom approach to atomic motion in laser light: the dipole force revisited“. In: *J. Opt. Soc. Am. B* 2.11 (Nov. 1985), S. 1707–1720.

zu beschäftigen. Der Hamiltonoperator ist somit

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \underbrace{\begin{pmatrix} (p - \hbar k)^2 & 0 & 0 \\ 0 & p^2 & 0 \\ 0 & 0 & (p + \hbar k)^2 \end{pmatrix}}_{\equiv \hat{H}_a} + \frac{\hbar \omega_R}{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}}_{\equiv \hat{H}_{\text{WW}}} \quad (2.47)$$

\hat{H}_a ist hierbei der Anteil der externen Freiheitsgrade und \hat{H}_{WW} der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator, d.h. die Lichtkopplung.

1. Beobachtung Es existiert ein Zustand der vom Lichtfeld entkoppelt, dieser ist durch

$$|\psi_{nc}(p)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|g_-, p - \hbar k\rangle + |g_+, p + \hbar k\rangle] \quad (2.48)$$

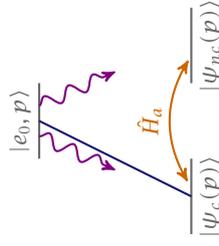
gegeben. Die Anregungsamplituden interferieren destruktiv (daher die Bezeichnung *dark state*), d.h.

$$\hat{H}_{\text{WW}} |\psi_{nc}(p)\rangle = 0.$$

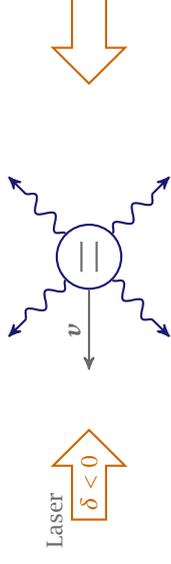
der orthogonale Zustand dazu interferiert dementsprechend konstruktiv und ist durch

$$|\psi_c(p)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|g_-, p - \hbar k\rangle - |g_+, p + \hbar k\rangle] \quad (2.49)$$

gegeben. Dieser wird daher auch als *bright state* bezeichnet. Das System kann somit reduziert werden, bzw. vereinfacht dargestellt werden. In Abbildung 53 ist das reduzierte System zu sehen.

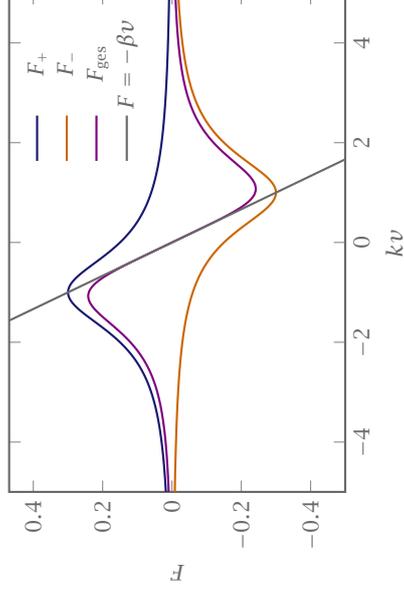


► 53 Reduzierte Darstellung des Systems mittels »dark state« $|\psi_{nc}(p)\rangle$ und »bright state« $|\psi_c(p)\rangle$. Die Kopplung der beiden Zustände verschwindet nur, wenn $\langle p \rangle = 0$ ist.



► 42 Zwei Niveaue Atom zwischen zwei entgegengesetzt gerichteten Lasern mit der Verstimmung $\delta < 0$.

P_e entspricht hierbei der Wahrscheinlichkeit im angeregten Zustand zu sein und \mathbf{k} dem Wellenvektor des Lasers. Die spontane Lichtkraft eines Lasers ist demnach



► 43 Die spontane Lichtkraft der beiden Laser über kv aufgetragen. Die Laser weisen hierbei eine typisches Lorentzkurve auf, sowie die Überlagerung beider Kurven zu einer resultierenden mit linearer Näherung im Ursprung. Die am linken Maximum bestimmte Geschwindigkeit v_{einfang} wird Einfanggeschwindigkeit genannt dessen Größe bei $kv_{\text{einfang}} = \Gamma/2$ liegt.

$$\mathbf{F} \propto P_e \propto S(\delta) = \frac{\omega_R^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4}.$$

Im Folgenden betrachten wir die Näherungen für $S \ll 1$ sowie $v \neq 0$, also bewegten Atomen und die Kraft für ein einziges Lichtfeld (linker Laser).

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \frac{\Gamma}{2} \frac{S}{S+1} \\ &\stackrel{S \ll 1}{\approx} \frac{\Gamma}{2} S(\delta) \hbar \mathbf{k} \\ &\stackrel{v \neq 0}{\approx} \frac{\Gamma}{2} S(\delta - kv) \hbar \mathbf{k}. \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung des anderen Lasers erhalten wir für die Gesamtkraft

$$\mathbf{F}_{\text{ges}} = \frac{\hbar k \Gamma}{2} [S(\delta - kv) - S(\delta + kv)]. \quad (2.41)$$

Linearisieren wir die Kraft im Ursprung, also um $v = 0$ erhalten ein Kraft der Form

$$F = -\alpha v.$$

Hierbei entspricht α einem Reibungskoeffizienten, wie wir ihn aus einem Dämpfungsterm der klassischen Mechanik her kennen. Eine kurze Rechnung zeigt, dass

$$\alpha = -\frac{\hbar k^2 \delta T \omega_R^2}{\delta^2 + \Gamma^2/4}.$$

Fluktuationen zu einem dissipativen Term führen, der noch vernachlässigt wurde. Dieser kommt aus der Diffusion der Atome (Random walk). Unter Berücksichtigung besagten Terms gilt für den Impuls

$$\langle p(t) \rangle = 0 \tag{2.42}$$

$$\langle p^2(t) \rangle \neq 0. \tag{2.43}$$

D.h. der Impulsmittelwert verschwindet, nicht jedoch der quadratische Impulsmittelwert. Bei der Diffusion gilt nach dem typischen random walk

$$\langle p^2(t) \rangle = 2D_p t, \tag{2.44}$$

wobei D_p die Diffusionskonstante im Impulsraum ist.

Bemerkung: Es gilt

$$k_B T = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle$$

$$\Delta p = \hbar k$$

$$\Rightarrow \Delta V = \frac{\Delta p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar}.$$

Δp entspricht dem Impulsunterschied zwischen absorbierten und emittierten Photonen, d.h. emittierte Photonen haben eine unterschiedliche Frequenz als absorbierte. \rightarrow

Demnach gilt

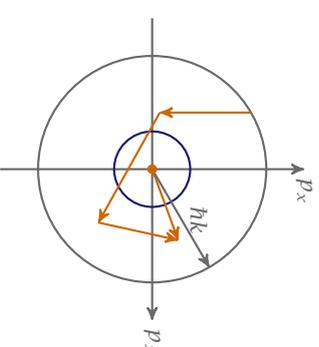
$$\langle p^2(t) \rangle = (\hbar k)^2 \underbrace{\Gamma_{sc}(v=0)}_{2D_p} (1 + \xi) \cdot t.$$

Die Terme der Klammer $(1 + \xi)$ haben hierbei die folgende Bedeutung:

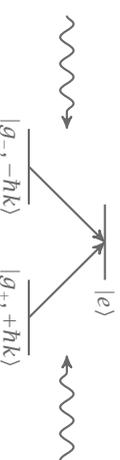
- ▶ Die 1 entspricht hierbei der statistischen Verteilung der absorbierten Photonen.
- ▶ Das ξ entspricht hierbei der statistischen Verteilung der emittierten Photonen. In einer Dimension ist $\xi = 1$. Für linear polarisiertes Licht in drei Dimensionen wird $\xi = 2/5$.

Γ_{sc} ist in diesem Kontext die Streurate (sc $\hat{=}$ scattering). Im Gleichgewicht gilt

$$k_B T = \frac{D_p}{\alpha} = \frac{1 + \xi}{8} \hbar \Gamma \left[\frac{2\delta}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{2\delta} \left(1 + \frac{2I}{I_{sat}} \right) \right].$$



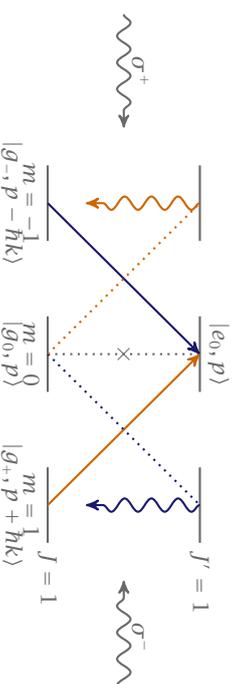
▶ 50 Impulsverteilung mit Streuung im Impulsraum.



▶ 51 Drei Niveaus Atom und entgegengesetzte Lichtfelder. g_+ und g_- müssen im Impulsraum zur konstruktiven, bzw. destruktiven Interferenz führen.

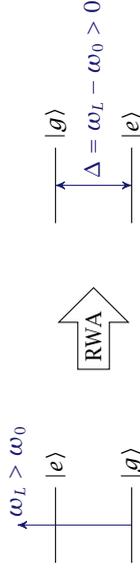
2.2.6 Subrecoil cooling

Wir betrachten ein System wie in Abbildung 52 dargestellt. Hierbei stellt σ_{\pm} senkrecht aufeinander polarisierte Lichtstrahlen dar. Übergänge der Form $m = m' = 0$ sind verboten. Die ebenen Wellen sind aufgrund der Impulserhaltung im System gekoppelt. Die Abbildung beinhaltet jedoch keine Verzerrung δ der Laser. Das \wedge und \vee -System (die Symbole sind



▶ 52 Übergang bei dem $J = J' = 1$ erhalten bleibt, da er erlaubt ist. Der Impuls wird größer bei Absorption durch einen positiven Puls von links nach rechts, dementsprechend wird er kleiner bei Absorption eines negativen Puls von rechts nach links.

stellvertretend für die eingezeichneten Übergänge) entkoppeln, d.h. es reicht sich nur mit \wedge



► 48 Energieschema im blau verstimmtten Lichtfeld und »rotating wave approximation«, wobei $\Delta = \omega_L - \omega_0 > 0$.

$$\lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p} = \lambda_{\text{opt}} \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda_{\text{opt}}} = \hbar k,$$

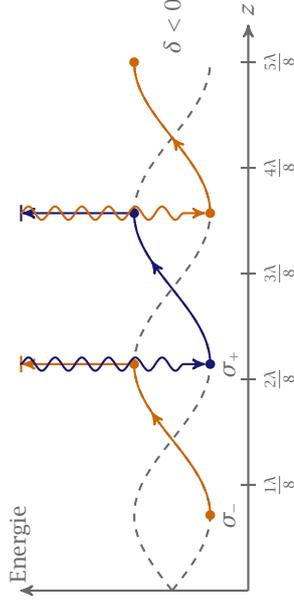
dann gilt für die kinetische Energie

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \stackrel{!}{=} k_B T_{\text{rec}},$$

mit der Rückstoßtemperatur T_{rec} , die im Größenbereich von $\sim 1 \mu\text{K}$ liegt.

Ortsabhängige Polarisation

Mittels der ortsabhängigen Polarisation ist es möglich auch für rot verstimmttes Licht $\delta < 0$ eine Kühlung zu erhalten. Siehe dazu Abbildung 49. Dies führt zu dem gesuchten Kraftprofil



► 49 Ortsabhängige Polarisation. Energie über Polarisation.

mit stärkeren Dämpfungsterm α , wie in Abbildung 46 gesucht. Die Vergrößerung zeigt das Kraftprofil um den Ursprung.

Um noch tiefere Temperaturen als T_{rec} zu erlangen betrachten wir Abbildung 50, in der eine Impulsverteilung mit Streuung im Impulsraum betrachtet wird. Um dies zu erreichen wird das Modell eines Drei-Niveau-Atom wie in Abbildung 51 verwendet. Hier wird vor allem die quantenmechanische Beschreibung der Bewegung wichtig.

T_D	Elemente
240 μK	Na
38 μK	He*
120 μK	Cr, Rb

► 7 Doppertemperaturen verschiedener Elemente.

Die I sind hierbei Intensitäten. Für kleine Intensitäten $I \ll I_{\text{sat}}$ folgt

$$k_B T_D \Big|_{\text{min}} = \frac{\hbar \Gamma}{2} \left(\frac{1 + \xi}{2} \right) \text{ für } \delta = -\frac{\Gamma}{2}. \quad (2.45)$$

Es zeigt sich, dass Gleichung (2.45) unabhängig von Größen wie m, k, λ, \dots ist, sondern nur von Γ abhängt. Tabelle 7 gibt hier verschiedene **Doppertemperaturen** T_D an.

Bemerkung: Die Dopplertemperatur ist in der Größenordnung von $\sim 100 \mu\text{K}$.

Der Vergleich mit experimentellen Messungen zeigt, dass die erreichten Temperaturen geringer als der theoretische Wert ist, d.h. das Experiment besser als die Theorie ist. Grund dafür sind zusätzliche Interferenzeffekte die im Versuch auftreten und die Kühlung unterstützen. Zur Bestimmung der Temperatur müssen immer zwei Kurven (Verteilungen) aufgenommen werden, die Anfangs- und die Endkurve. Nur so lässt sich die Kühlung messen. Eine ausführliche theoretische Behandlung der Dopplerkühlung ist im Anhang zu finden.

2.2.4 Magnetooptische Falle

Im Folgenden wollen wir einen s - und p -Zustand eines Atoms, wie in Abbildung 44 betrachten. Wobei eine Aufspaltung aufgrund eines Magnetfeldes zu sehen ist. Wieder lässt sich die spontane Lichtkraft um $r = 0$ linearisieren, wobei wir eine Kraft der Form

$$F = -\gamma r, \quad (2.46)$$

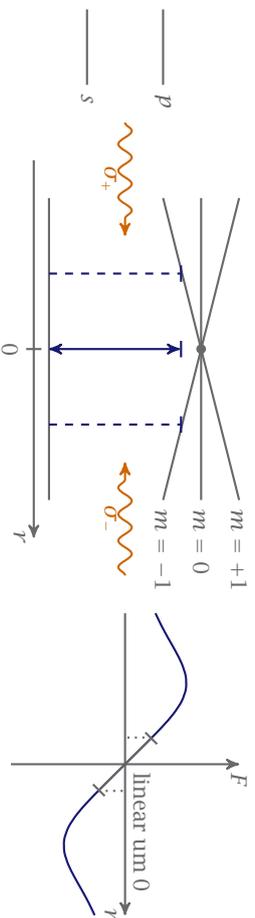
erhalten. γ ist das Analogon zu einer Federkonstante mit

$$\gamma = \alpha \frac{\partial \mu_B}{\partial z} = \frac{\partial B}{\partial z}.$$

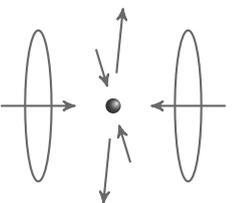
Abbildung 45 zeigt die schematische Anordnung in drei Dimensionen.

2.2.5 Die Sub-Dopplerkühlung

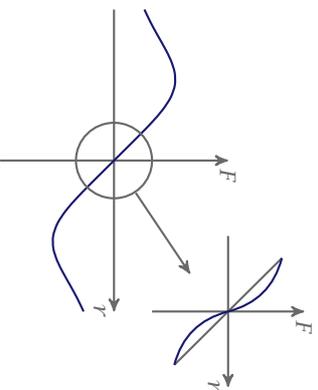
Wir betrachten Die Kraft-Geschwindigkeitskurve in Abbildung 46. Wie im obigen Abschnitt linearisieren wir im Ursprung. Das Experiment liefert jedoch tiefere Temperaturen $T < T_{\text{Doppler}}$ als die Theorie vorhersagt, d.h. der Dämpfungsterm ist zu gering. Wir suchen somit eine Funktion größere Steigung im Kraftprofil, wie sie skizziert ist um diesen zu vergrößern.



► 44 Aufgespaltenes s und p Niveau im Magnetfeld mit der spontanen Lichtkraft über den Ort aufgetragen, um den Vergleich zu Abbildung 43 zu bemerken.



► 45 Dreidimensionale Anordnung: Zwei Spulen zwischen denen das Atom sitzt.



► 46 Kraft-Geschwindigkeitskurve mit Linearisierung im Ursprung und Verbesserung der Theorie durch eine stärkere Steigung im Ursprung.

$$\Rightarrow k_B T = \frac{D_p}{\alpha}.$$

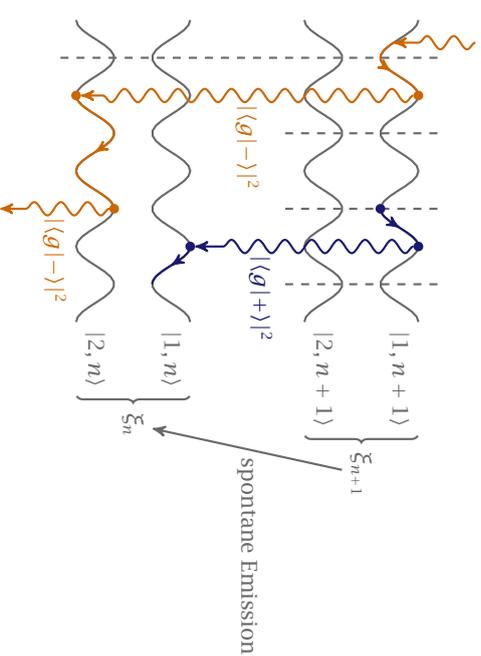
Letztendlich wird eine Theorie gesucht die ein größeres λ liefert. Eine Lösung bietet das »standing light field cooling for $\delta > 0$ « und die ortsabhängige Polarisation.

Standing light cooling

Ausgehend von einem zwei-Niveau-Atom in einem stehenden Lichtfeld mit der Verstimmung $\delta > 0$ erfolgt das »standing light cooling«. Für die Grenztemperatur erhalten wir

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = k_B T_{\text{rec}}.$$

Wir betrachten hierbei Zustände der Form $|\alpha; n\rangle$. n bezieht sich auf die Quantenzahl der Photonen, d.h. die Anzahl der Photonen des Lichtfeldes (siehe auch Abbildung 47). Die



► 47 Potentiallandschaft mit eingezeichneten Übergängen mittels Streuung, also Abgabe von Energie ans Lichtfeld. Spontane Emission reduziert die Anzahl der Photonen, die Übergangswahrscheinlichkeit beträgt hierbei $|\langle g|+\rangle|^2$, bzw. $|\langle g|-\rangle|^2$. Aufgetragen ist die potentielle Energie V_{pot} über der Position, hier z. Siehe hierzu auch Chohen-Tannoudji.

Kühlung besteht darin, dass das spontan emittierte Photon das System verlässt und ein Prozess der zum Aufstieg führt nicht mehr stattfindet. Bei blauer Verstimmung $\delta > 0$ ist die Streuung auf dem Potentialberg am höchsten, bei roter Verstimmung $\delta < 0$ dementsprechend im Potentialtal. Man spricht auch vom *Sisyphos Kühlmechanismus*. Bei blau verstimmen Licht erfolgt zum Beispiel erst eine Streuung wenn ein Atom im Grundzustand auf einen Potentialberg »gewandert« ist - unabhängig ob es der nächste oder übernächste Potentialberg ist (vgl. Sisyphos) - und somit eine Abgabe an Energie ins Lichtfeld. Das Modell entspricht dem von Photonen im Resonator.

Im blau verstimmen Lichtfeld liegt die Laserfrequenz über dem angeregten Zustand, siehe hierzu Abbildung 48. Wenn also